

539.192

КВАЗИМОЛЕКУЛЫ

Б. Г. Краков, Э. С. Парилис

(Институт электроники им. У. А. Арифова АН УзССР)

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	477
2. Статистические теории	481
2.1. Потенциал Фирсова. 2.2. Полуклассическая теория ионизации. 2.3. Статистическая модель.	
3. Квантовая теория квазимолекулы	482
3.1. Молекулярные орбитали. 3.2. Квазимолекулярные волновые функции. 3.3. Одноэлектронные правила корреляции.	
4. Автоионизация квазимолекул	487
4.1. Переходы в непрерывный спектр. 4.2. Автоионизационные состояния квазимолекул. 4.3. Оже-распад автоионизационных состояний. 4.4. Оже-переходы в квазимолекулах, образованных многозарядными ионами. 4.5. Радиационный распад автоионизационных состояний.	
5. Экзотические квазимолекулы	499
5.1. Сверхтяжелые системы и генерация позитронов. 5.2. Мезоквазимолекулы. 5.3. Квазимолекулы и деление ядер.	
6. Квазимолекулярное излучение	502
6.1. Вакансии во внутренних оболочках. 6.2. Спектр излучения. 6.3. Анизотропия излучения. 6.4. Столкновительное уширение.	
7. Заключение	506
Список литературы	507

1. Введение. Термином «квазимолекула» обозначается система из двух атомов, сближающихся и расходящихся в процессе столкновения. За исключением чрезвычайно редких случаев орбитирования, время жизни квазимолекулы равно времени пролета атомов друг относительно друга, которое для энергий 0,1—100 кэВ составляет 10^{-15} — 10^{-16} с. За это время ось квазимолекулы поворачивается на угол, равный $\pi - \theta$ (θ — угол рассеяния). В отличие от обычных молекул квазимолекулы не представляют собой устойчивых образований даже тогда, когда таковые существуют для данной пары атомов. Минимальное межъядерное расстояние — расстояние наибольшего сближения при столкновении — много меньше размеров обычных молекул. Оно может быть меньше размеров внутренних электронных оболочек, что позволяет говорить о «пределе слитых ядер» при описании квазимолекулы.

Введение представлений о квазимолекулах, квазимолекулярных состояниях и переходах основано на адиабатическом принципе, согласно которому электроны движутся гораздо быстрее ядер и образуют орбитали, соответствующие неподвижным ядрам. Чем глубже электронная оболочка, тем этот принцип выполняется лучше.

Понятия молекулярных орбиталей, предложенные еще в 1928 г. Р. Малликоном¹, впервые применили к атомным столкновениям в 1932 г. В. Вейцель и О. Бик². Они привлекли также идею Малликона о промотировании (выдвижении) термов при сближении атомов для объяснения высокого порога ионизации при атомных столкновениях. Интересно, что уже тогда они указали на эффект Оже как на механизм необратимой перестройки возбужденной

оболочки и на пересечение термов как на причину переходов между ними, В том же году Е. Штюкельберг³, Л. Д. Ландау⁴ и К. Зинер⁵ исследовали задачу о пересечении и псевдопересечении термов, которые затем в течение многих десятилетий применялись для описания перезарядки при атомных столкновениях.

Второе рождение интереса к квазимолекулам и начало бурного развития исследований в этой области относится к концу 50-х — середине 60-х годов, когда одновременно Ю. Эверхард с сотрудниками⁶ в США и Н. В. Федоренко и В. В. Афросимов с сотрудниками⁷ в СССР экспериментально обнаружили необычайно высокую интенсивность ионизации при столкновении

тяжелых атомов средних энергий и сопровождающие их характеристические потери энергии, связанные с образованием вакансий во внутренних оболочках сталкивающихся атомов.

Выяснилось, что сразу же за порогом ионизации при скоростях $5 \cdot 10^6$ — 10^7 см/с, задолго до того как скорость ионов сравняется с орбитальной скоростью электронов, сечения ионизации резко возрастают и превосходят сечения, рассчитанные в борновском приближении по механизму ударной кулоновской ионизации, на 14 порядков (!).

Такое сильное возбуждение электронных оболочек при медленных столкновениях, когда электроны по адиабатической гипотезе должны были бы еще следовать за движением ядер, свидетельствовало о существовании какого-то особого механизма возбуждения.

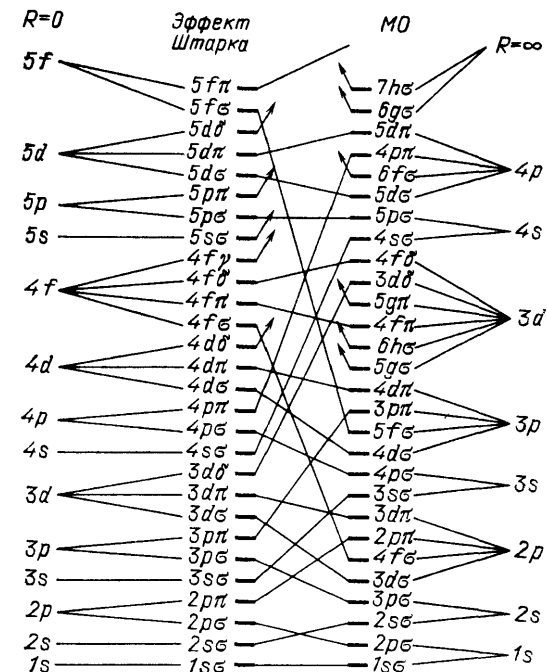


Рис. 1. Корреляционная диаграмма для термов гомоядерной одноэлектронной квазимолекулы²³

Им оказалось то, что впоследствии было названо «возбуждение Паули»⁸: при тесном сближении атомов двойному числу электронов попросту нет места на одноименных уровнях «объединенного атома», вследствие чего происходит перегруппировка состояний, выдвигание термов и их опускание, обмен электронами и вакансиями между пересекающимися термами (рис. 1—3). При этом скорость сталкивающихся атомов не играет существенной роли, обеспечивая лишь достижение необходимых межъядерных расстояний⁹.

Для объяснения двух из трех характеристических потерь энергии в опытах^{6, 7} У. Фано и В. Лихтен¹⁰ связали их с изъятием одного или двух электронов из *L*-оболочки аргона вследствие переходов между термами квазимолекулы Ar_2^+ . Третья характеристическая потеря (50 эВ) была объяснена¹¹ образованием вакансий во внешних оболочках, где число вакансий примерно вдвое превышает число испускаемых оже-электронов, а характеристические потери энергии в 2—3 раза больше энергии ионизации. В. К. Никулин¹² связал эту характеристическую потерю с автоионизационным состоянием иона Kr^+ , являющегося пределом объединенного атома для квазимолекулы Ar_2^+ .

Вообще для атомных столкновений характерно возбуждение квазимолекулярных автоионизационных состояний вследствие образования внут-

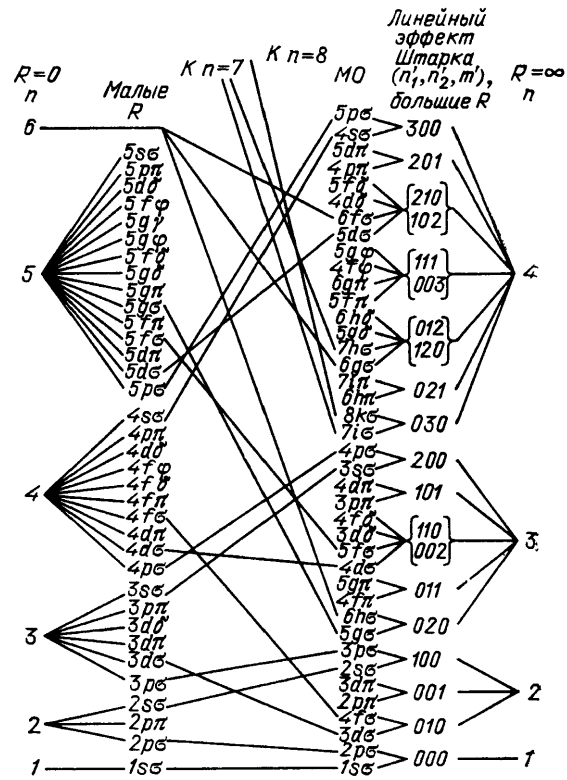


Рис. 2. Диабатическая одно-электронная корреляционная диаграмма для гомоядерной многоэлектронной квазимолекулы ²³

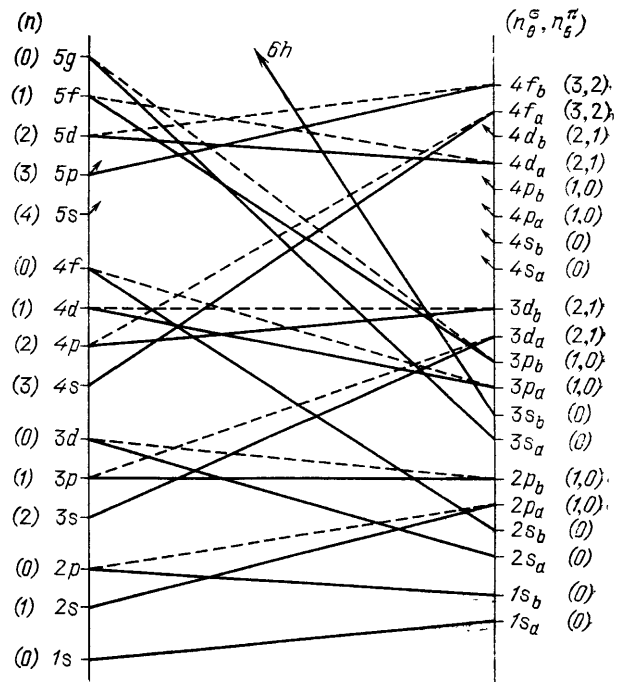


Рис. 3. Схематическая диабатическая корреляционная диаграмма для слегка асимметричной системы ²³. Непрерывные линии обозначают σ -орбитали, пунктир — π -орбитала. Числа в скобках представляют радиальное квантовое число для объединенного атома (слева) и угловое квантовое число для разъединенных атомов (справа)

ренных вакансий при пересечении термов. Распад таких состояний является источником значительной части испускаемых электронов. Это обстоятельство было понято далеко не сразу. Против автоионизационного механизма выдвигалось возражение, основанное на большом времени жизни атомных автоионизационных состояний (10^{-14} — 10^{-15} с) по сравнению со временем столкновения. К тому же автоионизационное состояние, возникающее при малых межатомных расстояниях, не всегда сохраняется после их разлета. Однако Б. М. Смирнов¹³ обратил внимание на то, что большие времена жизни автоионизационных состояний в атомах обусловлены их сферической симметрией, которая отсутствует в квазимолекуле.

Непосредственное вычисление скорости распада квазимолекулярных автоионизационных состояний в зависимости от расстояния между ядрами¹⁴ показало резкое ее возрастание в области $0,5 \text{ \AA}$, где она достигает величин, сравнимых и даже больших обратного времени пролета атомов. Это обстоятельство, означающее, что эмиссия электронов может происходить еще в процессе столкновения, сыграло решающую роль в утверждении автоионизационного механизма ионизации при атомных столкновениях. Упомянутый расчет был первым, в котором рассматривалась квазимолекула, образованная атомом и многозарядными ионами, а также исследовался межатомный эффект Оже и был введен термин «оже-ионизация».

Особенностью квазимолекулы является непрерывное изменение межатомного расстояния в течение всего времени жизни, а с ним всех зависящих от расстояния величин — волновых функций, термов, скоростей распада, заселенности уровней. Эта особенность, а также построенная Ю. Н. Демковым¹⁵ динамическая теория выдвижения термов в непрерывный спектр и постановка им некоторых общих вопросов теории обусловили интенсивные экспериментальные исследования типично квазимолекулярного эффекта — появления непрерывной составляющей в энергетическом распределении испускаемых в столкновении электронов. Были поставлены эксперименты по схеме совпадений, в которых прослеживался распад квазимолекулярных автоионизационных состояний при фиксированных параметрах удара¹⁶.

В 1972 г. тот же Р. Малликен провел компьютерный эксперимент¹⁷, в котором вычислил электронные термы двух атомов азота в зависимости от расстояния между ядрами. Он обнаружил, что при малых расстояниях энергии молекулярных орбиталей переходят в уровни атома кремния. Компьютерная программа, которой пользовался Р. Малликен, носила название АЛХИМИЯ, а идея расчета состояла в том, что, сближая атомы более легких элементов до малых межъядерных расстояний, можно на короткое время получить тяжелые атомы и исследовать их электронные уровни. Подобная алхимия XX в.¹⁸ была осуществлена при помощи ускорителей тяжелых ионов. Особый интерес представило получение квазиатомов сверхтяжелых трансурановых элементов, не существующих (или еще не открытых) в природе. Таким путем можно исследовать электронные термы атомов, не имея их: подбирая пары, для которых суммарное $Z = Z_1 + Z_2 > 173$, можно наблюдать рождение позитронов. Этот эффект также носит квазимолекулярный характер, так как при межъядерных расстояниях, меньших критического, энергия нижних орбиталей, например $1s\sigma$, становится по модулю больше $2mc^2$, и при наличии вакансии на этой орбитали она может заполняться электроном из дираковского континуума — происходит рождение позитрона.

Удостоенное премии Рентгена открытие в 1972 г. непрерывного рентгеновского излучения квазимолекулярного происхождения — так называемого молекулярно-орбитального излучения¹⁹ — дало возможность прямо «увидеть» квазимолекулу. Она способна излучать в течение столкновения, если время жизни возбужденных квазимолекулярных состояний порядка времени столкновения. Время жизни вакансий во внутренних оболочках сравнимо со временем столкновения тяжелых быстрых ионов с энергией в сотни килоэлектронвольт, а высокий, близкий к единице, выход флюоре-

сценции для атомных номеров, соответствующих слитым ядрам, обеспечивает распад вакансий не только путем эмиссии оже-электронов, но и за счет рентгеновского излучения. В отличие от характеристического, наблюдаемого обычно при атомных столкновениях, это излучение имеет непрерывный спектр вследствие зависимости энергии квантов от непрерывно меняющегося межъядерного расстояния.

В настоящее время квазимолекулы — эти «временные молекулы» — встречаются и играют существенную роль в широком круге физических процессов, связанных с актуальными проблемами воздействия пучков ускоренных тяжелых ионов на вещество, создания рентгеновских лазеров, разработки реакторов для управляемого термоядерного синтеза.

2. Статистические теории. Картина сближения, пересечения и выдвижения термов, а также образования вакансий при столкновении многоэлектронных атомов настолько сложна, что точный и детальный их расчет методами квантовой механики на первых порах был (да и теперь остается) затруднительным.

Сильное взаимодействие большого числа электронов, близкое расположение термов, образование промежуточных многовакансионных автоионизационных квазимолекулярных состояний, а также быстрое изменение всей картины с изменением межъядерного расстояния не позволяют, с одной стороны, безоговорочно применять ни один из известных методов квантовой механики, с другой — дают основание для использования статистических методов.

2.1. Потенциал Фирсова. Одним из первых применений статистической физики к расчету квазимолекул была работа О. Б. Фирсова²⁰, в которой энергия электронной оболочки квазимолекулы как функция межъядерного расстояния рассчитывалась по модели Томаса — Ферми.

Были введены минимальный и максимальный принципы, с применением которых рассчитанная вариационным методом энергия электронной оболочки была заключена между нижним и верхним пределами, которые могли сближаться до достижения необходимой точности.

В адиабатической теории зависящая от межъядерного расстояния энергия электронов вносит вклад в межатомный потенциал, обуславливая его отличие от кулоновского. Он имеет вид

$$V(R) = Z_1 Z_2 e^2 \chi \left[(Z_1^{1/2} + Z_2^{1/2})^{2/3} \frac{R}{a} \right] R^{-1}, \quad (2.1)$$

где R — межъядерное расстояние, Z_1 и Z_2 — атомные номера, χ — функция экранирования Томаса — Ферми, $a = 0,855a_0$ — параметр Томаса — Ферми, a_0 — радиус Бора.

Экранированный кулоновский потенциал Фирсова явился первым потенциалом, вычисленным на основе строгого квазимолекулярного подхода. Он уже 30 лет с успехом используется для расчета сечений рассеяния атомов в газах и твердом теле.

Дальнейшие усовершенствования потенциала, сделанные Абрахамсоном и самим Фирсовым²⁰, основаны на применении модели Томаса — Ферми — Дирака.

2.2. Полуклассическая теория ионизации. В 1959 г. О. Б. Фирсов предложил полуклассическую модель возбуждения электронов при атомных столкновениях путем внутреннего трения электронных оболочек сталкивающихся атомов²¹. В расчете также была использована квазимолекулярная модель Томаса — Ферми, однако обмен энергией между электронами быстрого и медленного атомов рассчитывался классически, как явление переноса в газах.

Средний импульс поступательного движения, приобретаемый электроном в одном из атомов, переносится через поверхность S , разделяющую область действия обоих атомов в квазимолекуле. Полная энергия возбуждения электронов квазимолекулы равна

$$E = 2m \int_{R_0}^{\infty} dR \frac{dR}{dt} \int_S dS \frac{nv}{4}, \quad (2.2)$$

где m — масса электрона, R_0 — расстояние наибольшего сближения,

$$n = 2^{3/2} (me\phi)^{3/2} (3\pi^2 \hbar^3)^{-1}, \quad v = 3 (3\pi^2)^{1/3} \hbar n^{1/3} (4m)^{-1} \quad (2.3)$$

— плотность электронного облака и скорость электронов по модели Томаса — Ферми, ϕ — потенциал на поверхности S :

$$\phi = 2 (Z_1 + Z_2) e\chi \left[0,565 (Z_1 + Z_2)^{1/3} \frac{R}{a_0} \right] R^{-1}. \quad (2.4)$$

В дальнейшем модель Фирсова была уточнена путем более строгого определения формы и положения поверхности S , учета искривления траектории атомов, их зарядов, оболочечных эффектов по методу Слэтера или на основе волновых функций Рутана — Хартри — Фока, а также с учетом времени, затрачиваемого на обмен электронами, и скорости распада автоионизационных состояний²¹.

С помощью модели Фирсова и ее модификаций с успехом рассчитываются неупругие потери энергии и сечения ионизации и обдирки при атомных столкновениях, коэффициенты ионно-электронной эмиссии и степень ионизации атомов, рассеянных поверхностью твердого тела.

2.3. Статистическая модель. Несколько иной подход, основанный на чисто статистическом рассмотрении процесса возбуждения электронов при атомных столкновениях, развил А. Рашек²². Он подробно рассмотрел разогрев электронов и их испарение, приводящее к ионизации. Была введена комбинаторика распределения порций энергии возбуждения среди электронов сталкивающихся атомов и получена последовательность максимумов и точек пересечения кривых распределения ионов по зарядам после столкновения. Однако сам процесс передачи энергии поступательного движения атомов электронами квазимолекулы просто постулировался, а величина переданной энергии бралась из эксперимента.

3. Квантовая теория квазимолекулы. Основой квазимолекулярного описания атомных столкновений является приближение Борна — Оппенгеймера, в котором разделяются на подсистемы электронная и ядерная части полного гамильтониана, а их взаимодействие учитывается по теории возмущений по параметру m/M . Мы не будем здесь касаться вопросов, связанных с движением ядер, и неадиабатических эффектов, возникающих из-за электрон-ядерного взаимодействия, которые исчерпывающе изложены в монографии²³.

Остановимся на описании электронной подсистемы, являющейся более динамичной по сравнению с ядерной и претерпевающей в процессе столкновения существенные изменения. Для этого необходимо знать волновые функции и энергии электронных термов в зависимости от межъядерного расстояния, матричные элементы межъядерного взаимодействия, связь термов квазимолекулы с термами образующих ее атомов.

В этой главе мы рассмотрим основные методы расчета электронных термов и волновых функций, а также способы установления соответствия между квантовыми числами объединенного атома и разъединенных атомов.

3.1. Молекулярные орбитали (МО). Это приближение эквивалентно методу самосогласованного поля в теории атома²³. Считается, что каждый электрон движется независимо в некотором статическом эффективном потенциале $V(\mathbf{r}, R)$, создаваемом полем ядер и всех других электронов. О свойствах потенциала предполагается, что он обладает молекулярной симметрией, допускает разделение переменных (например, в сфероидальных координатах) и зависит от R как от параметра. Приближение МО позволяет ввести понятие об энергии и квантовых числах отдельного электрона в молекуле и их зависимости от межъядерного расстояния.

Хотя в настоящее время отсутствуют четкие количественные критерии применимости метода МО, его можно считать пригодным для описания электронов в легких квазимолекулах, а также для внутренних оболочек средних и тяжелых систем^{23, 24}, т. е. в тех случаях, когда кулоновское взаимодействие электронов с ядрами много больше их взаимодействия между собой. При изменении межъядерного расстояния приближение МО справедливо, начиная с предела объединенного атома (ОА) до значений R таких, что уровни МО близки к одноэлектронным уровням разделенных атомов²³.

3.2. Квазимолекулярные волновые функции. Существуют два метода получения одноэлектронных волновых функций квазимолекулы: исторически более раннее и получившее большое распространение разложение по атомным волновым функциям и использование непосредственно молекулярных функций.

В первом случае одноэлектронная квазимолекулярная функция раскладывается по базисному набору, составленному из атомных орбиталей, центрированных на каждом ядре или на их центре масс. Обширная библиография, посвященная этим функциям, собрана в книгах^{23, 25}.

Молекулярные или двухцентровые волновые функции получаются непосредственно из решения уравнения Шрёдингера для электрона в поле двух кулоновских центров с зарядами Z_1 и Z_2 , расположенных на расстоянии R друг от друга:

$$\left(-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} \right) \Phi(\mathbf{r}, R) = E\Phi(\mathbf{r}, R). \quad (3.1)$$

Уравнение (3.1) допускает разделение переменных в вытянутых сфероидальных координатах ξ, η, φ :

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}, \quad \varphi = \arctg \frac{y}{x}. \quad (3.2)$$

$\Phi(\mathbf{r}, R)$ называется сфероидальными кулоновскими функциями. Исчерпывающее изложение теории сфероидальных функций, алгоритмов вычисления, их приложений в различных областях, а также обширная библиография собраны в работе²⁶. Из более поздних работ, посвященных вычислению двухцентровых функций, можно отметить работы^{27, 28}. Использование двухцентровых функций получило распространение в последние годы, когда появление производительных ЭВМ позволило быстро и с высокой точностью вычислять их при произвольном соотношении зарядов ядер Z_2/Z_1 и в широком интервале R . Кроме того, кулоновские сфероидальные функции непосредственно отвечают симметрии молекулы, что в конечном итоге значительно уменьшает длины базисных разложений по этим функциям.

Что касается волновых функций непрерывного спектра в квазимолекуле, то в их роли используются или обычные атомные кулоновские функции континуума, центрированные тем или иным образом, или двухцентровые волновые функции, удовлетворяющие (3.1) с энергией $E \geq 0$ ²⁸.

Большой интерес вызвали работы²⁹⁻³², в которых при расчете термов одноэлектронной двухцентральной задачи при комплексных значениях R были обнаружены неизвестные ранее адиабатические связанные²⁹⁻³¹, вирту-

альные и квазистационарные состояния³². Замечательным свойством связанного терма является его пересечение ридберговского сгущения уровней и выход в сплошной спектр. Его продолжением в континууме является квазистационарный уровень. Наличие таких уровней указывает на возможность прямой ионизации квазимолекулы из связанного состояния, дает возможность вычислить сечение и энергетический спектр электронов^{29, 32}.

Все сказанное выше относилось к квазимолекуле с одним электроном. Для расчета многоэлектронных систем применяются различные вариации метода самосогласованного поля и идеология эффективных потенциалов. В работах^{33–39} методом ССП рассчитаны одноэлектронные функции и энергии ряда гомо- и гетероядерных квазимолекул — как нейтральных, так и ионизованных.

В работах, посвященных эффективным потенциалам, взаимодействие рассматриваемого электрона с ядрами и другими электронами описывается параметрическим одночастичным потенциалом. Используемые методы разнятся лишь процедурой определения параметров потенциала. В большинстве работ используются потенциалы, допускающие разделение сфероидальных координатах, что значительно упрощает численные расчеты. Общий вид такого потенциала в сфероидальных координатах²⁶

$$V(\xi, \eta, \varphi, R) = -\frac{2}{R^2} \left[\frac{a(\xi) + b(\eta)}{\xi^2 - \eta^2} + \frac{c(\varphi)}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \right], \quad (3.3)$$

где $a(\xi)$, $b(\eta)$ и $c(\varphi)$ — полиномы от ξ , η , φ . Впервые потенциал типа (3.3) использовался для расчета основного состояния молекулы H_2 в работе⁴⁰. Там $c(\varphi)$ полагался равным нулю, $a(\xi) = R(a_0 + a_1\xi)$, $b(\eta) = Rb_2\eta^2$. Параметры a_0 , a_1 и b_2 находятся из условия совпадения потенциала (3.3) при $R \rightarrow 0$ с потенциалом $V(r)$ объединенного атома, а при $R \rightarrow \infty$ — с потенциалом для атома водорода в поле далекого кулоновского центра. В работах^{41, 42} этот метод был обобщен на случай гетероядерных квазимолекул с двумя и более электронами. Функция

$$a(\xi) = R(a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2), \quad b(\eta) = R(b_1\eta + b_2\eta^2),$$

a_i и b_i выбирались как постоянными, так и зависящими от R . В этом случае применялась вариационная процедура. Рассчитанная энергия основного состояния и положение равновесия для квазимолекул H_2 , He_2^{2+} , HeH^+ хорошо согласуется с расчетами по Хартри — Фоку. Как указывалось в работе⁴⁰, расчет электронных состояний с эффективным потенциалом типа (3.3) с параметрами, определяемыми вариационным методом, в некотором роде эквивалентны методу ССП. В ряде работ^{43–46} в качестве эффективного потенциала использовался потенциал Томаса — Ферми. Этим методом были рассчитаны одноэлектронные состояния для большого числа гомо- и гетероядерных квазимолекул $N + N^{n+}$ ($n = 0, 1, 2$), $Ne + Ne^{n+}$ ($n = 0, 2, 4$), $Ar + Ar$, $Kr + Kr$, $Xe + Xe$, $Ne + Ar$, $Ar + Xe$, $Kr + Xe$. Дальнейшее развитие метод эффективного потенциала получил в работах^{47–50}, где был предложен потенциал $V_{эфф}(\xi, \eta, \varphi, R)$ типа (3.3), учитывающий расщепление термов с разными l в пределе объединенного атома:

$$V_{эфф}(\xi, \eta, \varphi, R) = -\frac{2}{R(\xi^2 - \eta^2)} [(Z_1 + Z_2 - a_1)\xi R + (Z_2 - Z_1 - b_1)R\eta - a_0R - \tilde{a}_1 - b_2R\eta^2], \quad (3.4)$$

где Z_1 и Z_2 — заряды ядер, соответствующие расстояниям r_1 и r_2 . Для гомоядерной системы параметр $b_1 = 0$ в силу симметрии гамильтониана, параметр \tilde{a}_1 дает расщепление энергии уровней с разным l при данном n в пределе

объединенного атома. Параметры a_1 и \tilde{a}_1 для данной молекулярной орбитали определяются из сравнения энергии и среднего значения потенциала (3.4) при $R = 0$ с этими же величинами, получаемыми из атомных расчетов, например, методом ССП. Параметры a_0 , b_1 или b_2 определяются аналогично. Этим методом были рассчитаны одноэлектронные энергии квазимолекул He_2^{2+} , Ne_2^{+g} ($g = 1, 2, 4$), Kr_2^+ и др. Достоинством этого метода является корректный учет расщепления термов с данным n при $R = 0$, простота алгоритмов расчета, связанная с тем, что потенциал (3.4) разделяется в сфероидальных координатах и сводится к хорошо изученной задаче квазимолекулы H_2^+ . Сравнение расчетов^{47, 48–50} с другими, выполненными более трудоемкими способами, например переменного экранирования^{43, 45, 46}, указывает на хорошее согласие. Кроме того, в этом методе одинаково быстро и точно получаются как основное, так и возбужденные состояния, что затруднительно в методах ССП.

Для непрерывного спектра в настоящее время отсутствуют расчеты как в рамках эффективного потенциала, так и методом Хартри — Фока. В большинстве работ^{51–54} в качестве волновой функции континуума использовались одноцентровые кулоновские функции или функции Бесселя. Наиболее общий подход развит в работе⁵⁵. Точная волновая функция континуума с учетом взаимодействия с другим электроном в конечном дискретном состоянии (рассматривалась двухэлектронная квазимолекула) является решением интегродифференциального уравнения с нелокальным потенциалом

$$-\frac{\Delta r}{2} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} + \int |\psi_j(\mathbf{r}_0, R)|^2 r_{01}^{-1} \psi_c(\mathbf{r}_1, R) d\tau_0 = \\ = E\psi_c(\mathbf{r}_1, R) - \int \psi_j(\mathbf{r}_1, R) \psi_c(\mathbf{r}_0, R) r_{01}^{-1} d\tau_0. \quad (3.5)$$

Функция $\psi_j(\mathbf{r}, R)$ описывает электрон в конечном дискретном состоянии. Уравнение (3.5) численно решалось как непосредственно, так и без учета обменного члена в правой части. Кроме того, рассматривались решения (3.5) без учета интегральных членов, соответствующие одинаковой экранировке зарядов Z_1 и Z_2 . К сожалению, даже численное решение (3.5) является трудной задачей. В связи с этим в работе⁵⁶ был предложен метод переменного экранирования зарядов ядер Z_1 и Z_2 , значительно упрощающий решение (3.5). Расчеты^{55, 56} выполнены для разных систем, и трудно сопоставить результаты для оценки применимости использованных приближений для функций континуума.

3.3. Одноэлектронные правила корреляции. Даже для одноэлектронной квазимолекулы вычисление термов при произвольном R возможно лишь численно²⁶, поэтому возникает проблема получения качественных правил соответствия электронных уровней от предела разделенных атомов до предела объединенного атома. Основой для построения таких правил, называемых также корреляционными диаграммами (КД), служит приближение молекулярных орбиталей (МО). Существенные ограничения на взаимное положение электронных термов квазимолекулы накладывает теорема о непересечении^{57, 58}. Согласно этой теореме при непрерывном изменении параметра могут совпадать собственные значения гамильтониана $H(R)$, относящиеся к разным неприводимым представлениям полной группы симметрии этого гамильтониана. Собственные значения, относящиеся к одинаковым неприводимым представлениям, совпадать не могут. Разделение переменных в сфероидальных координатах одноэлектронной двухатомной молекулы указывает на существование дополнительной симметрии, отличной от геометрической^{59, 60}. Действительно, наряду с проекцией момента электрона l_z интегралом движения является оператор константы разделения,

который в сфероиальных координатах имеет вид⁶⁰⁻⁶²

$$\Lambda = \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \left[(1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} - (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] + \\ + \left(\frac{1}{\xi^2 - 1} - \frac{1}{1 - \eta^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial^2 \varphi} + RZ_1 \frac{\xi\eta + 1}{\xi + \eta} - RZ_2 \frac{\xi\eta - 1}{\xi - \eta}, \quad (3.6)$$

где Z_1 и Z_2 — заряды ядер.

Одноэлектронная двухцентровая система является единственной, для которой возможно установить точные правила корреляции для термов^{63, 64}. Эти правила опираются на теорему о сохранении числа нулей решения задачи Штурма — Лиувилля, зависящей от параметра R . Однако одних корреляционных правил⁶⁴ недостаточно для построения КД, так как эти правила не устанавливают порядка следования термов. Для этого необходимо установить положение термов в пределах $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$. При малых R одноэлектронная энергия $E(R)$ имеет вид²⁶

$$E(R) = -\frac{Z^2}{2n^2} - 2Z_1Z_2[l(l+1) - 3m^2] \frac{(ZR)^2}{n^3l(l+1)(4l^2-1)(2l+3)}, \quad (3.7)$$

где $Z = Z_1 + Z_2$. Из (3.7) видно, что ниже лежат термы с меньшим m при данном n и l , а при n и $m = \text{const}$ самый низкий уровень с $l = 1$, а самый высокий — с $l = 0$. При больших R , например для Z_1 -терма²⁶,

$$E(R) = -\frac{Z_1^2}{2n^2} - \frac{Z_2}{R} + \frac{3Z_2n(n_1 - n_2)}{2R^2Z_1}. \quad (3.8)$$

Здесь ниже располагаются термы с большим n_2 при данном n . Полученная таким образом корреляционная диаграмма для σ -термов одноэлектронной томоядерной молекулы приведена на рис. 1⁶⁵. Легко видеть, что при переходе от предела разъединенных атомов (РА) к пределу объединенного атома (ОА) главное квантовое число, как правило, возрастает. Это явление получило название промотирования (выдвижения) электронных уровней¹.

Для многоэлектронных квазимолекул правила корреляции⁶⁴ неприменимы. Это связано с невозможностью разделения переменных в параболических координатах в пределе разъединенных атомов. В работах^{10, 65, 66} были предложены следующие правила:

$$n_r^{\text{OA}} = n_r^{\text{PA}}, \quad (3.9)$$

где n_r — число нулей решения радиальной функции ($n_r = n - l - 1$). Причем при данном n^{PA} меньше всего промотируют подуровни, лежащие ниже. Пример КД гомоядерной системы приведен на рис. 2²².

В ряде работ были рассчитаны одноэлектронные волновые функции и энергии различных гомо- и гетероядерных квазимолекул в широком интервале R с использованием метода Хартри — Фока^{33, 34, 36, 67-72} и Томаса — Ферми^{43-45, 73-76}. При расчете этих диаграмм были обнаружены квазипересечения термов, противоречащие правилу (3.9). В связи с этим в работе⁴⁵ были предложены новые правила корреляции взамен (3.9):

$$n_r^{\text{OA}} = n_\theta^{\text{PA}} = (l - m)^{\text{PA}}, \quad (3.10)$$

где n_θ — число нулей угловой функции. В противоположность (3.9) корреляции устанавливаются между подуровнями, максимально испытывающими выдвижение и падение в пределах данной оболочки. Схематическая диаграмма с использованием правил (3.10) изображена на рис. 3. В работе⁷⁷ за счет введения новой области пересечений при больших R делается попытка улучшить правила (3.9). В работе⁴⁸ были получены корреляционные диаграммы, не согласующиеся с правилами (3.10). Авторы⁴⁸ связывают этот факт с одинаковой экранировкой всех орбиталей, применяемой в работах⁴³⁻⁴⁵, и предлагают выбирать параметры эффективного потенциала индивидуально для каждого состояния. Как указывается в работе⁷⁸, правила (3.9) и (3.10)

являются эмпирическими, их использование для получения корреляционных диаграмм требует дополнительных допущений. Здесь получены строгие правила корреляции в предположении, что каждую МО с определенным главным квантовым числом можно построить из кулоновских МО с тем же n :

$$\begin{aligned} n_r^{\text{OA}} = n_r^{\text{PA}}, \quad n_\theta^{\text{OA}} = 2n_\theta^{\text{PA}} & \quad \text{для симметричных орбиталей,} \\ & = 2n_\theta^{\text{PA}} + 1 \quad \text{для антисимметричных орбиталей.} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Можно отметить, что первое равенство в (3.11) совпадает с (3.9). Формула (3.11) получена без учета поведения термов при изменении R . Эффект Штарка приводит к квазипересечениям, которые меняют порядок термов. В этом случае коррелируют те МО, квантовые числа которых удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} n_r^{\text{OA}} = n_\theta^{\text{PA}}, \quad n_\theta^{\text{OA}} = 2n_r^{\text{PA}} & \quad \text{для симметричных орбиталей,} \\ & = 2n_r^{\text{PA}} + 1 \quad \text{для антисимметричных орбиталей.} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Первое из условий (3.12) совпадает с (3.10). Аналогично строятся корреляции для гетероядерных систем.

Построение корреляционных диаграмм для многоэлектронных систем и их применение в задачах атомных столкновений тесно связано с понятиями об адиабатическом и диабатическом поведении сталкивающихся систем^{23, 79}. В силу равенства нулю радиальной неадиабатической связи между диабатическими термами одинаковой симметрии, вероятность перехода между этими термами мала при больших скоростях, тогда как для диабатических термов она мала при малых скоростях. Выделение диабатического гамильтониана $H_{\text{диаб}}$ из полного адиабатического гамильтониана H позволяет упростить процедуру построения термов и установления правил корреляции, а также построить базис, удобный для рассмотрения столкновений при больших энергиях²³. Этим вопросам посвящены также обзоры^{80–83}. Корреляционные правила (3.9) — (3.12) могут быть проверены экспериментально при исследовании распада вакансий во внутренних оболочках, образующихся при атомных столкновениях^{80, 81}. В частности, данные, полученные при столкновениях симметричных атомов⁸⁴, указывают на справедливость правил (3.9), а для асимметричных систем подтверждаются правила (3.10).

4. Автоионизация квазимолекул. Эмиссия электрона связана как с прямыми переходами в непрерывный спектр из дискретных уровней квазимолекулы, так и за счет образования и последующего распада автоионизационных состояний. Автоионизационные состояния связаны с вакансиями во внутренних оболочках, которые возникают при взаимодействии атомов с многозарядными ионами или в процессе промотирования уровней. Автоионизационное состояние характеризуется энергией E и частотой распада в единицу времени W (шириной ΔE), которые в квазимолекуле зависят от R . Знание $E(R)$ и $W(R)$ дает возможность вычислить энергетические спектры электронов и сечения ионизации, которые можно сравнить с экспериментальными данными. В последнее время появилась возможность извлекать зависимости $E(R)$ и $W(R)$ непосредственно из эксперимента.

В этой главе рассматривается модель прямой ионизации за счет выдвижения в континуум диабатического терма, обсуждаются различные способы образования и методы расчета квазимолекулярных автоионизационных состояний и рассматриваются безызлучательные и радиационные каналы их распада.

4.1. Переходы в непрерывный спектр. При рассмотрении энергетических термов квазимолекул E возможна ситуация, когда при некотором $R = R_0$ дискретный терм пересечет границу непрерывного спек-

тра. Это означает, что при $R \leq R_0$ связанное состояние в системе отсутствует, терм становится квазистационарным и возможна ионизация. Адиабатические термы такого типа существуют в квазимолекулах, образующихся при столкновениях отрицательных ионов с атомами. Подробный обзор теоретических и экспериментальных работ, посвященных ионизации при медленных столкновениях отрицательных ионов с атомами, содержится в работе⁸⁵.

При взаимодействии положительных ионов с атомами наличие кулоновского сгущения уровней вблизи границы непрерывного спектра делает невозможным выход в континуум адиабатического терма.

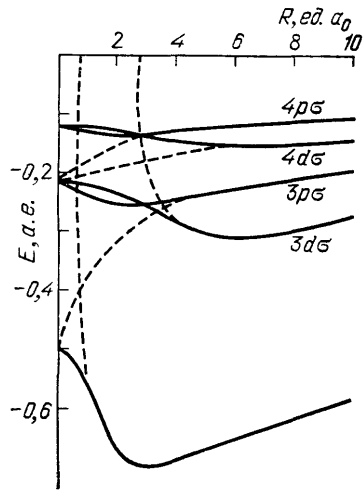


Рис. 4. Адиабатические (сплошные линии) и диабатические (штриховые линии) термы для квазимолекул H_2^+ ²⁹

В связи с этим большой интерес вызывал поиск диабатических термов, пересекающих кулоновское сгущение и выходящих в сплошной спектр. Общая задача о пересечении диабатическим термом системы термов для одноэлектронной системы с двумя кулоновскими центрами была решена в работе⁸⁶. Однако до недавнего времени такие термы не были обнаружены для реальных квазимолекул. Впервые такие термы были получены в работе²⁹. Здесь рассчитывались термы одноэлектронной двухцентровой задачи при комплексных значениях межъядерного расстояния R . Были получены парные пересечения адиабатических термов E_{Nlm} и $E_{N+1,lm}$ последовательно для всех значений $N \geq l + 1$. Эти пересечения имеются для всех значений зарядов ядер Z_1 и Z_2 . Когда R мало, точки пересечения лежат вблизи вещественной оси, и на ней возникают бесконечные серии квазипересечений. Полученные точки пересечения R_{Nlm} с разными N и фиксированными l, m образуют бесконечную

последовательность, локализованную в малой области комплексной плоскости и сходящуюся к некоторой предельной точке

$$R_{lm} = \lim_{N \rightarrow \infty} R_{Nlm}. \quad (4.1)$$

В этой области термы серии с данным l и m описываются приближенной формулой

$$E_{lm}(R) = -(Z_1 + Z_2)^2 \left(2 \left| \ln \frac{R - R_{lm}}{2\pi i} \right|^2 \right)^{-1}. \quad (4.2)$$

При обходе вокруг точки пересечения происходит переход с терма на терм с другим N при данном l, m .

Наличие бесконечных серий квазипересечений можно рассматривать как взаимодействие выходящего в сплошной спектр диабатического терма с бесконечной ридберговской серией⁸⁷. Так как область пересечений мала, диабатический терм круто уходит вверх. На рис. 4 приведены адиабатические и диабатические термы, полученные для квазимолекул H_2^+ . Наличие квазипересечений, выводящих диабатический терм в континуум, как считается в работе²⁸, связано с перестройкой потенциала при переходе от двухцентровой задачи к одноцентровой при $R \rightarrow 0$. При этом вначале перестраиваются самые нижние уровни в данной серии l, m , соответствующие адиабатические термы выгибаются вверх с уменьшением R и отражаются от вышележащего адиабатического терма. Таким образом, возникает бесконечная цепочка квази-

пересечений. Полученное из этого качественного рассмотрения выражение для точки выхода терма в сплошной спектр (для $m = 0$)

$$R_l = l(l+1)(Z_1 + Z_2)^{-1} \quad (4.3)$$

хорошо согласуется с результатами численного расчета.

Наличие особых точек в комплексной области позволило единым образом решить такие проблемы в задаче двух центров, как разный радиус сходимости разложений для энергий состояний при малых R и наличие минимумов у термов, для которых выполняется условие $l(l+1) > 3m^2$. При использовании результатов²⁹ для вероятности ионизации за счет квазипересечений получена формула для сечения прямой ионизации с терма Nlm :

$$\sigma = \pi \nu N^2 |R_{Nlm}|^2 \exp\left(-\frac{2Zl}{\nu N^2}\right) \left(1 - \exp\left[-\frac{l^3(l+1)^2}{\nu N^2 Z |R_{Nlm}|^2}\right]\right) (Zl)^{-1}, \quad (4.4)$$

где $Z = Z_1 + Z_2$. Сравнение с экспериментом по ионизации водорода протонами показало, что сечение (4.4) в несколько раз ниже, что объясняется вкладом в сечение процесса резонансной перезарядки с последующей встречной электронов в континуум. Сравнение необходимо производить для систем, в которых отсутствует резонансная перезарядка, например HeH^+ .

Этим же методом в работе³² обнаружены квазистационарные и виртуальные уровни в двухцентрковой кулоновской задаче, связанные с выходом в континуум адиабатического терма. Данные о зависимости энергии квазистационарного терма E от R дают возможность вычислить энергетический спектр электронов при ионизации с выдвигавшегося адиабатического терма. В работе⁸⁸ экспериментально измерен спектр электронов при прямой ионизации протоном атома гелия в кэВ-диапазоне энергий и произведен расчет этого же спектра по формулам работы²⁹. Согласие обоих спектров служит надежным подтверждением рассмотренному в работах^{29, 32} механизму прямой ионизации.

В работе⁸⁹ была предложена модель прямой ионизации в континуум с сильно промотирующего дискретного терма за счет неадиабатических переходов. Эксперименты^{90, 91} указывают, что этот механизм справедлив в кэВ-диапазоне энергий сталкивающихся атомов.

4.2. Автоионизационные состояния квазимолекул. Известны три механизма образования автоионизационных состояний в процессе атомных столкновений. Это столкновение возбужденных атомов или атомов в основном и возбужденном состоянии, называемое процессом Пеннинга⁹². В этом случае ионизация происходит за счет суммарной энергии возбуждения при передаче возбуждения более легко ионизируемому атому. Второй механизм связан со столкновениями с участием многозарядных ионов, когда образуется квазимолекула с большим числом внутренних вакансий — свободных уровней иона. Заполнение этих вакансий приводит к многократной ионизации. Этот процесс получил название оже-ионизации⁹³. Наконец, на основе рассмотрения корреляционных диаграмм для уровней в квазимолекуле было показано^{10, 66, 65}, что выдвигание уровней в процессе сближения атомов приводит к пересечению термов и образованию вакансий во внутренних оболочках за счет неадиабатических переходов между заполненными и незаполненными оболочками. Последующий распад вакансий приводит к ионизации. Этот механизм реализуется в основном для многоэлектронных квазимолекул.

Одним из основных методов изучения автоионизационных состояний квазимолекул является их описание как резонансов в рассеянии электронов на квазимолекуле. От энергии и ширины уровня зависит фазовый сдвиг при рассеянии вблизи резонанса. Так, для расчета энергий и ширин резонансов при рассеянии электрона на H_2^+ использовалась параметрическая формула

зависимости фазового сдвига от энергии и ширины уровня^{94, 95}

$$\eta_{lm} = ak(R) + b + \sum_{i=1}^N \operatorname{arctg} \frac{\Gamma_i(R)}{(k_i^2(R)/2) - E_i(R)}, \quad (4.5)$$

где k — импульс рассеянного электрона, a и b — подгоночные параметры, $\Gamma_i(R)$ и $E_i(R)$ — ширина и энергия i -го резонанса. Для расчета фазового сдвига использовался вариационный принцип Кона с пробными функциями в сфероидальных координатах. В работе⁹⁶ энергия автоионизационного состояния E_0 также находится из фазы рассеяния $\delta_l(E_0)$,

$$\delta_l(E_0) = \pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \left. \frac{\partial}{\partial E} \delta_l(E) \right|_{E=E_0} > 0, \quad (4.6)$$

где $n = 0, 1, \dots$, а ширина уровня определяется через асимптотику решения уравнений Шрёдингера для рассеяния $\chi(x) \sim \sin[kx - (l\pi/2) + \delta_l(E)]$

$$\Gamma \approx K \left(M \int_0^{x_0} \chi^2(x) dx \right)^{-1}; \quad (4.7)$$

здесь M — приведенная масса, x_0 — первый нуль $\chi(x)$ вне области действия потенциала. Метод, примыкающий к методу сильной связи каналов, развит в работах^{97, 98}, где система связанных интегродифференциальных уравнений заменяется системой алгебраических уравнений при замене интегралов с неизвестной функцией квадратурными формулами типа Гаусса. В качестве базисных используются одноцентровые функции метода ССП. В расчете учитываются обменные члены.

Метод комплексного масштабного преобразования, предложенный в работе⁹⁹, определяет энергию и ширину автоионизационного состояния как действительную и мнимую части комплексного собственного значения гамильтониана, полученного масштабным преобразованием электронных координат $r \rightarrow \eta r$, где $\eta = \alpha \exp(i\theta)$. Этот метод был применен для расчета автоионизации в молекулах^{100, 101}. В этих работах преобразуются только координаты электронов в квазимолекуле, т. е. сначала применяется приближение Борна — Оппенгеймера, а затем переход к комплексным координатам. Для идентификации автоионизационных состояний используется комплексная теорема вириала¹⁰². Практически ищутся особые точки в зависимости собственных значений комплексного гамильтониана от параметра θ . Положение особой точки дает искомое значение энергии и ширину уровня. В качестве базисных функций использовались гауссовские орбитали.

4.3. О ж е - р а с п а д а в т о и о н и з а ц и о н н ы х с о с т о я н и й. Использование рассмотренных выше методов для расчета конкретных квазимолекулярных систем представляет собой достаточно сложную задачу, требующую очень трудоемких численных расчетов. Лишь с распространением мощных ЭВМ стало возможным производить детальные вычисления энергий и частот распадов низколежащих автоионизационных состояний, и то лишь простейших двух- и трехэлектронных систем. Изучение таких квазимолекул, как гомоядерные H_2 , He_2^+ и гетероядерные HeH^+ и др., соответствует по своему значению расчетам нижних автоионизационных уровней в атоме гелия, так как позволяет оценить различные приближения теории без влияния посторонних факторов. Кроме того, для таких квазимолекул облегчается постановка эксперимента и интерпретация результатов.

Распад автоионизационного состояния в квазимолекуле при больших межъядерных расстояниях R рассматривался в работе⁵⁴. Потенциал взаимодействия, приводящий к распаду, выбирается диполь-дипольным. Ионизация рассматривается как двухстадийный процесс: излучение фотона с последую-

шей фотоионизацией. Это приводит к следующей формуле для ширины уровня $\Gamma(R)$:

$$\Gamma(R) = c [(d_x)_{ik}^2 \sigma_{\Phi}^x + (d_y)_{ik}^2 \sigma_{\Phi}^y + 4 (d_z)_{ik}^2 \sigma_{\Phi}^z] (2\pi \Delta E R^6)^{-1}, \quad (4.8)$$

где ΔE — энергия перехода, $(d_j)_{ik}$ — матричные элементы дипольного момента, σ_{Φ}^i — сечения фотоионизации, c — скорость света.

В работах^{103–105} был предложен простой метод вычисления энергий двух-электронных квазимолекул, в том числе автоионизационных состояний. Используется одноконфигурационная волновая функция $\Phi(1, 2)$, составленная из симметризованного произведения одноэлектронных двухцентровых функций, умноженных на функцию $E(g, r_{12})$, содержащую явно координаты их относительного движения r_{12} , g_l — эффективный параметр, $g_l = 1$ для синглетных состояний, $g_l = 0,5$ — для триплетных. В качестве функции $E(g, r_{12})$ используется модифицированная функция Бесселя — Клиффорда первого порядка. Энергия вычисляется в первом порядке теории возмущений. Простой метод расчета резонансов в рассеянии предложен в работах^{106–108}. К его достоинствам относятся использование лишь функций дискретного спектра для расчетов энергий и ширин автоионизационных состояний, несложный способ выявления резонансов на фоне других состояний. Для этого рассчитываются собственные значения гамильтониана при переменном числе базисных функций. Собственные значения рассматриваются как функции числа базисных конфигураций. Если энергия «стабилизируется», т. е. не зависит от размера базиса, то она соответствует резонансному состоянию. В работах^{109–111} был развит диагонализационный метод конфигурационного взаимодействия, основанный на формализме проекционных операторов^{112–114}. Этот метод в настоящее время получил наибольшее распространение при расчетах автоионизационных состояний, в том числе в квазимолекулах. В диагонализационном методе автоионизационные состояния рассматриваются как стационарные, а их связь с континуумом учитывается приближенно, в первом порядке теории возмущений. Парциальная частота распада $W_g(S, R)$ имеет вид

$$W_g(S, R) = 2\pi |\langle \psi_a(S, R) | V | \psi_E^g(S, R) \rangle|^2; \quad (4.9)$$

здесь $\psi_E^g(S, R)$ — волновая функция конечного состояния с индексом g , описывающая систему после распада, когда один из электронов находится в непрерывном спектре. Если возможен распад в разные конечные состояния, то полная частота $W(S, R)$ равна сумме парциальных частот (4.9). Функции $\psi_a(S, R)$ выражаются через симметризованные произведения одноэлектронных функций дискретного спектра, причем, следуя¹⁰⁹, из этого набора исключаются функции дискретного спектра, описывающие конечное состояние системы.

Расчеты автоионизации в атомах показали¹¹¹, что диагонализационный метод дает такую же точность приближения к эксперименту, что и более фундаментальные, но гораздо более громоздкие методы: сильной связи^{115, 116} и Фано^{117, 118}. Метод позволяет задним числом проверить ряд приближений, положенных в его основу. Достоинствами диагонализационного метода являются его наглядность, простота расчетных формул, легкость численной реализации на ЭВМ, контроль вкладов отдельных базисных конфигураций $\Phi_n(\Lambda, S)$ в полную волновую функцию, энергию и вероятность распада автоионизационного состояния. Однако достижение высокой точности требует учета в разложении большого числа конфигураций, особенно для высоковозбужденных состояний. Это приводит к необходимости диагонализации матриц большой размерности.

Начальные расчеты автоионизации в квазимолекулах посвящены второму¹⁴ и первому^{51, 119, 120} механизмам. Несмотря на несовершенство методики, уже в ранней работе¹⁴ были получены такие существенные особенности

автоионизации в квазимолекулах, как резкое увеличение вероятности оже-переходов по сравнению с пределом объединенного атома; корреляция максимума вероятности перехода с минимумом в энергии вылетающего оже-электрона; наличие трех возможных каналов оже-ионизации; большие, порядка газокинетических, сечения оже-ионизации; возможность наблюдения оже-ионизации при самых малых скоростях ионов.

Основное внимание в расчетах уделяется простейшим гомоядерным системам H_2 и He_2^{2+} . Квазимолекула H_2 стала основным полигоном для проверки различных методов расчета автоионизационных состояний. Как правило, исследуются нижние автоионизационные состояния различной симметрии, как наиболее просто идентифицируемые и хорошо выделенные на фоне

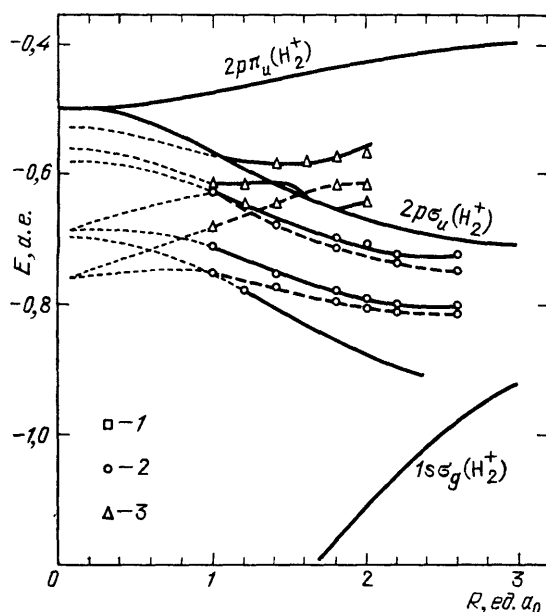


Рис. 5. Энергии автоионизационных состояний различной симметрии для H_2^{+} . 1 — Σ_g^+ , 2 — Σ_u^+ , 3 — Π_u . Сплошные линии для синглетных состояний, штриховые — для триплетных

более высоколежащих термов. Диагонализационный метод использовался в работах^{121–126}, другую группу представляют работы^{95, 98, 127, 128}, рассматривающие автоионизационные состояния как резонансы в рассеянии электрона на квазимолекуле H_2^+ , метод комплексного масштабного преобразования¹⁰⁰ и теория возмущений¹⁰⁴. Расчеты для H_2^+ в основном выполнены диагонализационным методом^{49, 126, 129–132} и по теории возмущений¹⁰². На рис. 5 и 6 приведены энергии ряда нижних автоионизационных состояний квазимолекул H_2 и He_2^{2+} . Хорошо видны характерные области квазипересечений термов, характеризующиеся резким сближением энергетических кривых. Пересечение автоионизационных уровней одноэлектронного основного состояния квазимолекулы приводит к тому, что распад становится невозможным. На рис. 7 приведена энергия наинизшего $1\Sigma_g^+$ автоионизационного состояния квазимолекулы H_2 , рассчитанные разными методами. Видно, что в широкой области изменения R согласие расчетов, произведенных разными методами, хорошее. Для частот распада картина несколько иная. Рис. 8 демонстрирует кривые частоты распада для того же состояния, полученные в этих же расчетах. При $R < 1,6a_0$ все расчеты в основном хорошо согласуются между собой. В области $R > 1,6a_0$ данные разбиваются на две группы, внутри которых опять-таки имеется хорошее согласие. Одну группу представляют расчеты, выполненные диагонализационным методом, другую — методами теории рассеяния. Данные работ^{97, 121} резко отличаются друг от друга и от данных других работ. Так, полученная в работе¹²¹ зависимость $W(R)$ имеет максимум при $R \approx 1,8a_0$ и спадает к точке стабилизации.

С другой стороны, для квазимолекулы He_2^{2+} была рассчитана зависимость частоты распада $W(R)$ от межъядерного расстояния R также для наинизшего $1\Sigma_g^+$ автоионизационного состояния¹³¹. Функция и энергии одно-

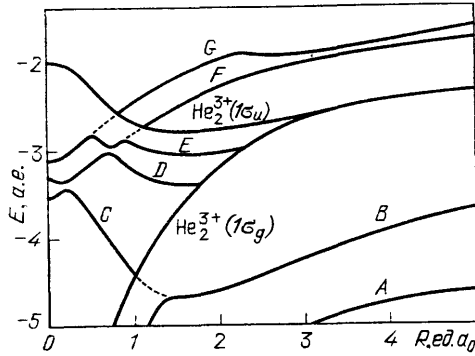


Рис. 6. Электронные термы для $1\Sigma_g^+$ -состояний He_2^{3+} ⁵⁵. A, B — однократно возбужденные состояния, C, D, E, F, G — автоионизационные состояния⁵⁵

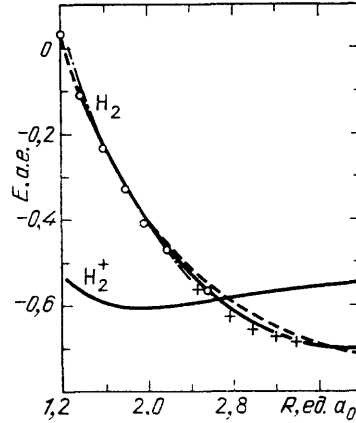


Рис. 7. Энергия наинизшего $1\Sigma_g^+$ -автоионизационного состояния квазимолекулы H_2 , рассчитанная различными методами¹²⁵

электронных квазимолекул с одинаковым отношением $Z_2/Z_1 = k$ связаны масштабным преобразованием²⁶

$$R' = \frac{R}{n}, \quad \psi_i(R') = \psi_i\left(\frac{R}{n}\right), \quad E_i = n^2 E_i. \quad (4.10)$$

Для квазимолекул He_2^{2+} и H_2 $n = 2$. Учет взаимодействия электронов при расчете энергий автоионизационных термов нарушает простой масштабный закон (4.10), но сравнение результатов¹³¹ с учетом масштабирования, дает неплохое согласие. Если с этой же точки зрения сравнить данные расчетов частот распадов термов, то результаты¹³¹ скорее согласуются с результатами¹²¹, хотя и качественно. Совпадают положения максимумов $W(R)$, а также спад к точке стабилизации. Количественно результаты сильно разнятся, хотя в атоме, например, вероятность оже-распада слабо зависит от заряда ядра. В работе¹³³ из экспериментальных данных по спектрам электронов, эмиттируемых в столкновениях $\text{He}^+ + \text{He}$, с использованием приближения Эйри¹³⁴ для описания спектра получены энергия и частота распада автоионизационного состояния в зависимости от R . Полученные результаты хорошо согласуются с данными работы¹²⁹. Авторы¹³³ указывают, что это свидетельствует о применимости приближения Эйри¹³⁴ для описания автоионизационных спектров в столкновениях легких атомов.

Гетероядерные системы исследовались не в таком большом количестве работ, зато спектр исследованных систем более широк. Это квазимолекулы $\text{HeH}^{+56, 135}$, $\text{HeH}^{136, 137}$, HeLi^{3+138} , HeBe^{4+139} , HeC^{6+140} . В работе¹³⁷ исследована зависимость вероятности оже-перехода от частичного состояния электрона в континууме. На рис. 9 приведены матричные элементы оже-перехода $I_l(R)$ в l -состояние непрерывного спектра при разных R в широком

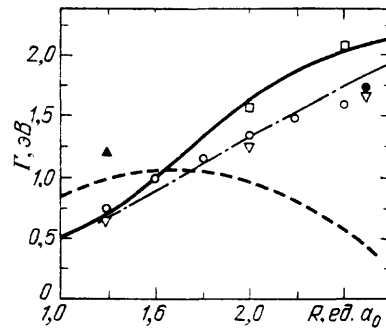


Рис. 8. Ширина уровня наинизшего $1\Sigma_g^+$ -состояния, полученная различными методами¹²⁵

интервале значений l . При фиксированном R I_l является осцилляторной функцией от l , а при фиксированном l $I_l(R)$ осциллирует с R . $I_l(R)$ имеет максимум по l , когда l и R связаны с уравнением точки поворота

$$E_3 = -\frac{1}{R} + \frac{l_{\max}^2}{2R^2}, \quad l_{\max} = (2E_3 R^2 + 2R)^{1/2}. \quad (4.11)$$

При $l < l_{\max}$ $I_l(R)$ осциллирует по l , при $l > l_{\max}$ $I_l(R)$ экспоненциально затухает. Из (4.17) видно, что с ростом R растет число состояний непрерывного спектра, в которые осуществляется оже-переход. В работах, посвященных квазимолекуле HeH^+ , в рамках метода диагонализации исследовались

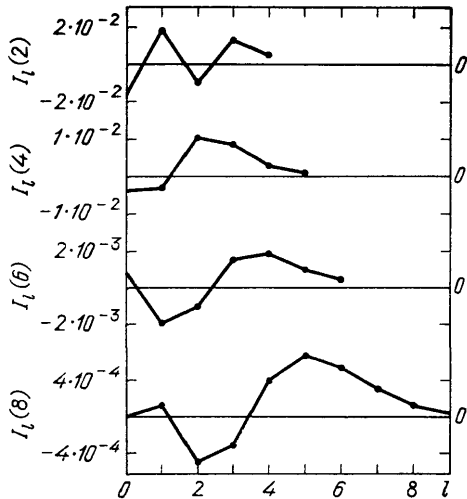


Рис. 9. Матричный элемент оже-перехода $I_l(R)$ в l -состояние непрерывного спектра как функция R и l

эффекты взаимодействия конфигураций и их влияние на энергии и частоты распадов автоионизационных состояний. Расчеты показывают, что вне области квазипересечений адиабатических термов полная волновая функция характеризуется преобладающим вкладом определенной конфигурации. В области квазипересечения становятся сравнимыми вклады двух и более конфигураций, коэффициенты разложения c_n меняют знак. Квазипересечение термов сказывается также на зависимости полной $W(R)$ и парциальных $W_g(R)$ частот оже-переходов от R . На рис. 10 представлены полные и парциальные частоты оже-переходов для автоионизационных состояний $1^1\Sigma^+$ и $2^1\Sigma^+$. В области квазипересечений при $R \approx 0,35a_0$ для $1^1\Sigma^+$ и $0,4a_0 < R < 0,5a_0$

для $2^1\Sigma^+$ происходят осцилляции в зависимости от R парциальных частот $W_g(R)$, которые проявляются и в полных частотах $W(R)$. Эти особенности, в отличие от осцилляции, полученных в работе¹³⁷, связаны с тем, что пересекаются состояния, скорости распадов которых по-разному зависят от R . Необходимо отметить, что если учет взаимодействия конфигураций приводит к относительному изменению энергии на $\Delta E/E = \varepsilon = 0,03-0,05$, то относительное изменение частоты оже-перехода составляет уже $\Delta W/W \approx \varepsilon^{1/2} \approx 0,2$. Резкий спад $W(R)$ при $R > 1,5a_0$ связан с тем, что волновая функция автоионизационного состояния локализована на легком ядре H^+ , что связано с преобладающим вкладом конфигурации $(2p\sigma)^2$, тогда как вакансии на $1s\sigma$ -орбиталях при больших R принадлежат тяжелому ядру He . Рост барьера между ядрами при увеличении R приводит к экспоненциальному спаду $W(R)$. Сравнение с учетом масштабного преобразования (4.10) расчетов квазимолекул HeH^+ и HeBe^{4+} , для которых $n = 2$, указывает на их хорошее согласие. Отметим, однако, что с ростом n из-за уменьшения относительной величины возмущения $1/r_{12}$ уменьшается конфигурационное взаимодействие и увеличивается вероятность оже-перехода.

При переходе к более асимметричным системам с $k = 3$, например к HeC^{6+} , сохраняются отмеченные выше особенности квазимолекулярных автоионизационных состояний. Однако здесь проявляются новые интересные свойства, которые необходимо отметить¹⁴¹. В системе HeC^{6+} волновые функции электронов в начальном состоянии и в связанном состоянии после перехода при больших R локализуются на тяжелом ядре C , т. е. и после разлета автоионизационное состояние сохраняется. Это приводит к тому, что область спада $W(R)$ переходит при $R > 1,5a_0$ в область, в которой частота распада начинает возрастать. Асимптотическое поведение $W(R)$ при $R \rightarrow \infty$ свя-

зано с вопросом, в какие атомные состояния переходят данные квазимолекулярные автоионизационные состояния и каковы частоты их распадов. При $R \rightarrow \infty$ наличие иона He^{2+} сводится к появлению внешнего электрического поля. Подобная задача о распаде автоионизационного состояния в поле иона рассматривалась в работе¹⁴².

Представляет интерес сопоставить расчеты нижних автоионизационных состояний $1\Sigma^+$ для ряда гомо- и гетероядерных квазимолекул¹⁴¹. На рис. 11 приведены кривые $W(R^*)$ для самых нижних адиабатических состояний

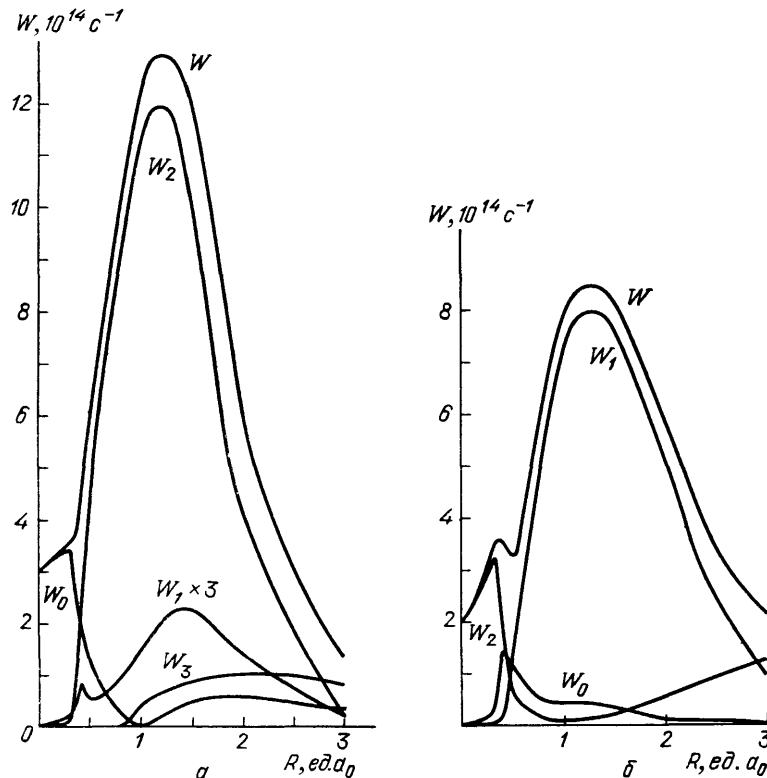


Рис. 10. Полные $W(R)$ и парциальные $W_g(R)$ частоты оже-переходов для самых нижних I(a) и II (б) $1\Sigma^+$ -автоионизационных состояний квазимолекулы HeH^+ ⁵⁶

квазимолекул H_2 , He_2^{2+} , HeH^+ , HeBe^{4+} , HeC^{6+} . Обобщенное межъядерное расстояние $R^* = (Z_1 + Z_2) R/3$. Все эти состояния характеризуются преобладающим вкладом конфигурации $(2p\sigma)^2$ в полную волновую функцию. Характерно, что максимумы частот термов расположены примерно при одном и том же значении $R^* \approx 1,2a_0$. Все величины $W_{\max}(R^*)$ превышают 10^{15} c^{-1} , хотя и отличаются сильным разбросом. Все это позволяет сделать вывод, что поведение $W(R^*)$ в области $R^* \leq R_{\max}^*$ и $R^* \geq R_{\max}^*$ определяется свойствами конфигурации $(2p\sigma)^2$ в объединенной потенциальной яме с $Z = Z_1 + Z_2$. Поведение $W(R^*)$ в асимптотической области R^* зависит от степени k системы. Для симметричных квазимолекул при некотором конечном R_k^* происходит пересечение термина автоионизационного состояния с термом однократно ионизированной квазимолекулы, и оже-распад становится энергетически запрещен. В случае $1 < k < 3$ волновая функция начального состояния локализуется на более легком ядре, а вакансия принадлежит более тяжелому. Тогда $W(R^*) \sim \exp(-\alpha R^*)$ из-за необходимости туннелирования через потенциальный барьер. При $k \geq 3$ в области больших R^* нижнее квазимолекулярное автоионизационное состояние переходит в такое же состояние на тяжелом ядре плюс электрическое поле легкого ядра. В этом

случае вероятность оже-перехода выходит на постоянную. Этими тремя случаями исчерпываются возможные типы поведения $W(R^*)$ при $R^* \rightarrow \infty$.

В многоэлектронных квазимолекулах, как уже отмечалось выше, автоионизационные состояния могут образовываться за счет механизма выдвижения уровней и образования вакансий во внутренних оболочках. Распад таких автоионизационных состояний

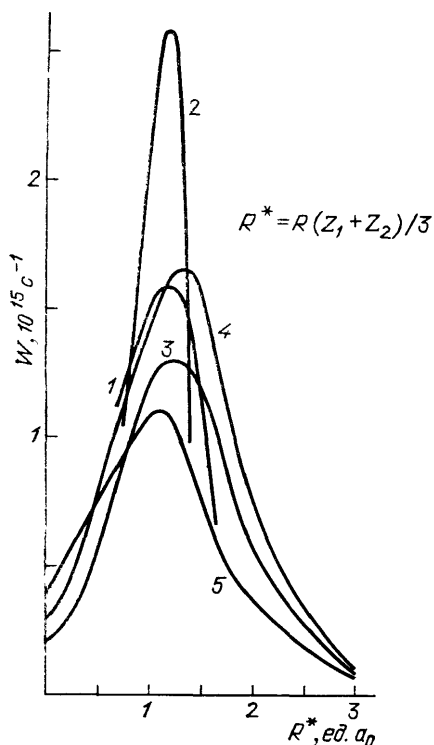


Рис. 11. Частоты оже-переходов для самых нижних $1\Sigma^+$ -адиабатических состояний двух электронных квазимолекул¹⁴¹. 1 — H_2 , 2 — He_2^+ , 3 — HeH^+ , 4 — $HeBe^{4+}$, 5 — HeC^{4+}

изучался экспериментально в работах^{143, 144}, где из анализа энергетических спектров эмиттированных электронов в рамках приближения Эйри¹³⁴ получены оценки вероятности оже-переходов на снижающуюся орбиталь $4p\pi$ для квазимолекулы Kr_2^+ и $2p\pi$ -орбиталь для квазимолекул Ne_2^+ и O_3^+ , которые составляют соответственно величины порядка 10^{16} и 10^{15} c^{-1} . В работе¹⁴⁵ рассматривалась автоионизация с участием многозарядных ионов. Для системы $HeXe^{2+}$ из измеренных дифференциальных сечений ионизации получена обратная степенная зависимость вероятности $W(R)$ от R , причем $W(R)$ достигает величин $>10^{15} \text{ c}^{-1}$. К сожалению, выделение зависимости $W(R)$ из экспериментальных данных связано с некоторыми априорными предположениями относительно поведения энергий и частот распадов от R , которые не всегда оправданы. Теоретических работ крайне мало, что связано с большой трудоемкостью таких расчетов. Имеются работы по пеннинговской ионизации^{146, 147}. В работах^{141, 148} предпринята попытка использовать хорошо себя зарекомендовавшие при

расчете энергий дискретных квазимолекулярных состояний волновые функции эффективного потенциала^{47, 50} и экранированные функции непрерывного спектра⁵⁶ для расчета вероятности распада $2p\pi$ -вакансии в квазимолекуле Ne_2^+ . Это первая попытка прямого получения $W(R)$ в многоэлектронной системе. Полная вероятность заполнения вакансии за счет рассмотренных в работе переходов достигает в максимуме величины 10^{15} c^{-1} , что согласуется с оценками¹⁴⁴. С увеличением R $W(R)$ подчиняется правилу для симметричных систем: автоионизационное состояние исчезает.

Полученные значения $W(R)$ в несколько раз превосходят значения W в пределе объединенного атома, что наблюдалось и в расчетах для простейших квазимолекул. Это подтверждает вывод о том, что такое возрастание $W(R)$ является типичным квазимолекулярным эффектом.

4.4. Оже-переходы в квазимолекулах, образованных многозарядными ионами. В настоящее время получены пучки ионов небольших энергий с высокими зарядами, вплоть до полностью оголенных ядер. При сближении медленного высокозарядного иона с многоэлектронным атомом образуется квазимолекула, в которой с самого начала имеется инверсная заселенность уровней электронами. Такая система должна быстро релаксировать путем оже-переходов, вероятность которых зависит от межъядерного расстояния.

Существует возможность распада подобной инверсно заселенной квази-молекулы с испусканием высокоэнергетичных электронов путем многоэлектронных «дробных» оже-переходов¹⁴⁹ и, прежде всего, трехэлектронного половинного эффекта Оже¹⁵⁰, при котором одновременно заполняются две или более вакансий, а вся энергия передается меньшему числу электронов или даже одному оже-электрону. Теория половинного эффекта Оже в квази-молекуле построена в работе¹⁵¹.

Для расчета вероятности половинного оже-эффекта может быть использовано приближение встряски. В этом приближении вероятность трехэлектронного перехода $W(R)$ имеет вид

$$W(R) = 2\pi |\langle f | V | i \rangle|^2 = W_A(R) \int \Phi_g^* \Phi_m d\tau = W_A(R) W_S(R), \quad (4.12)$$

где f и i — полные волновые функции конечных и начальных состояний, v — оператор возмущения, Φ_m и Φ_g — начальная и конечная функции электрона, претерпевающего встряску, $W_A(R)$ — вероятность обычного оже-перехода, $W_S(R)$ — вероятность встряски, R — межъядерное расстояние. Вычисления электронных волновых функций и матричных элементов, входящих в (4.12), выполнены в модели двух кулоновских центров.

В качестве простейшего примера можно рассмотреть столкновение го-лого ядра C^{6+} с трехэлектронным атомом Li. Исходная конфигурация образующейся квази-молекулы LiC^{6+} имеет вид $(2p\sigma)^2 4d\sigma$, основное состояние — $(1s\sigma)^2$. По формуле (4.12) были рассчитаны вероятности встряски W_S , оже-перехода W_A и полная вероятность трехэлектронного перехода W в основное состояние $(1s\sigma)^2$ в зависимости от межъядерного расстояния R .

Возрастание $W(R)$ с изменением R обусловлено увеличением как вероятности обычного оже-процесса, так и вероятности встряски в квази-молекуле вследствие уменьшения энергии оже-электрона, смягчения правил отбора, увеличения перекрытия волновых функций. И W_A , и W_S проходят через максимум при $R \approx 0,6a_0$, при этом $W_S(R)$ достигает 10^{-2} , в отличие от аналогичной величины в атоме, где она порядка 10^{-4} ¹⁵⁰. При больших R , из-за того что волновые функции основного и возбужденного состояний локализованы на разных ядрах, $W(R) \rightarrow 0$.

Энергетический спектр оже-электронов $d\sigma/dE$ рассчитывался по формуле¹³⁷

$$\frac{d\sigma}{dE} = 4\pi R_E^2 W(R_E) \left| \frac{dE}{dR} \right|^{-1} \left(1 - \frac{u_0(R_E)}{E_0} \right)^{1/2} v_0^{-1}, \quad (4.13)$$

где v_0 — относительная скорость столкновения, E_0 — энергия в системе центра инерции, $u_0(R)$ — потенциал взаимодействия атома и иона, R_E — межъядерное расстояние, при котором испускается электрон с энергией E . На рис. 12 приведены спектры электронов для половинного оже-процесса и, для сравнения, обычного оже-перехода из этого же автоионизационного состояния для двух начальных энергий E_0 — 0,5 и 2 кэВ.

Видно, что половинный эффект Оже приводит к появлению высокоэнергетического пика при энергии $E \approx 490$ эВ, практически не перекрывающегося со спектром обычного оже-перехода и отличающегося по интенсивности всего на два порядка. При таких начальных энергиях иона невозможно получить подобный электронный спектр за счет других процессов, например ударной ионизации. Если в качестве мишени взять атом с большим числом электронов, то из-за увеличения числа возможных электронных переходов роль половинного эффекта Оже возрастает по сравнению с обычным оже-процессом. Действительно, в квази-молекуле с N внешними электронами и M внутренними вакансиями вероятность трехэлектронного перехода $W \sim N(N-1)(N-2)M(M-1)$, а обычного оже-перехода — $W_A \sim N(N-1)M$. Тогда относительная вероятность половинного оже-эффекта $W_S = W/W_A \sim (N-2)(M-1)$.

Сечение половинного эффекта Оже σ рассчитывалось по формуле¹³⁷

$$\sigma = \frac{4\pi}{v_0} \int_{R_m}^{\infty} R^2 W(R) \left(1 - \frac{u_0(R)}{E_0}\right)^{1/2} dR, \quad (4.14)$$

где R_m — расстояние наибольшего сближения ядер при лобовом соударении. На рис. 13 приведена зависимость сечения σ от скорости v_0 . Видно, что сечение σ меняется как $1/v_0$. Это связано с тем, что интеграл в (4.14) слабо меняется как функция скорости (от скорости зависит лишь R_m). Сечение во всем интервале скоростей довольно велико и достигает величины порядка 10^{-19} см². В работе¹⁵², где был экспериментально обнаружен трехэлектронный оже-переход в атоме при жестких атомных столкновениях с большой энергией, при которых образуется необходимая дивакансия в L -оболочке,

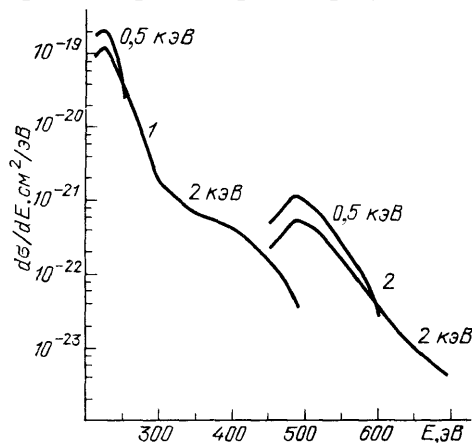


Рис. 12. Энергетические спектры оже-электронов.
1 — оже-эффект; 2 — половинный оже-эффект¹⁵¹

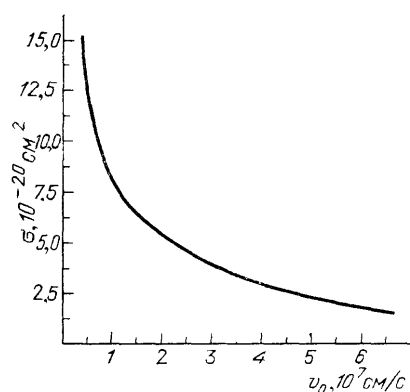


Рис. 13. Зависимость сечения половинного оже-процесса от относительной скорости столкновения многозарядного иона с атомом¹⁵¹

сечение перехода оказалось порядка 10^{-21} см². Эта величина обусловлена малой величиной сечения образования в одном столкновении двух внутренних вакансий, составляющего 10^{-18} см², и относительной вероятностью половинного эффекта Оже в атоме $\sim 10^{-4}$.

Значительно большая величина сечения половинного эффекта Оже при участии многозарядных ионов 10^{-19} см² связана не только с повышенным значением его относительной вероятности в квазимолекуле (в максимуме до 10^{-2}), но и наличием большого числа готовых вакансий во внутренних оболочках.

Что касается оже-переходов более высокой кратности, которые следует ожидать для высокозарядных ионов, то они приведут к появлению в энергетическом спектре убывающих по интенсивности пиков с энергиями, приблизительно кратными энергии обычного оже-перехода. Таким образом, при столкновении медленных (10^{-6} — 10^{-7} см/с) многозарядных ионов, например голых ядер с многозарядными атомами, следует ожидать появления, с сечением до 10^{-18} см², высокоэнергетических оже-электронов с энергией в несколько кэВ и даже десятки килоэлектрон-вольт.

4.5 Радиационный распад автоионизационных состояний. Наряду с оже-переходами возможен распад автоионизационных состояний за счет излучения. Вероятность радиационных переходов резко растет с увеличением энергии излучения и зарядов ядер, в связи с чем радиационные переходы характерны для средних и тяжелых квазимолекул и внутренних оболочек¹⁵³.

Для спектроскопии квазимолекулярных автоионизационных состояний необходимы данные по зависимости энергии излучения E и частоты радиационного распада W_R от межъядерного расстояния R . Более подробно квазимолекулярное излучение будет рассмотрено в разделе 6. Здесь мы остановимся на расчетах $W_R(R)$. Энергия излучения $E(R)$ определяется просто как разность термов начального и конечного состояния.

Радиационный распад автоионизационных состояний обусловлен в основном электронным дипольным моментом $\mathbf{p}_e = -(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)e$. Частоты радиационных переходов в квазимолекуле, как и частоты оже-переходов, являются функцией межъядерного расстояния. При фиксированном расстоянии R между ядрами квазимолекулы частота радиационного перехода имеет вид¹⁵⁴

$$W_R(R) = 4E_{if}^3(R) |\langle i | \mathbf{p}_e | f \rangle|^2 (3\hbar c^3)^{-1}; \quad (4.15)$$

здесь $E_{if}(R) = E_i(R) - E_f(R)$ — энергия фотона.

Несмотря на то, что расчет $W_R(R)$ гораздо проще, чем вычисление вероятности оже-перехода $W_A(R)$, работ, посвященных расчету $W_R(R)$, очень мало. В работе¹⁵⁵ рассматривался переход $1\pi_g - 1\sigma_g$ в квазимолекуле N_2 , а в работе¹⁵⁶ — радиационный распад $1\Sigma^+$ -автоионизационных адиабатических состояний квазимолекулы HeH^+ . Здесь же проводилось сравнение с частотами оже-переходов $W_A(R)$ из этих же автоионизационных состояний. На рис. 14 представлены полные частоты радиационного $W_R(R)$ и оже-распада $W_A(R)$ двух нижних $1\Sigma^+$ автоионизационных состояний квазимолекулы HeH^+ ¹⁵⁶. Как указывалось в разделе 4.3, квазипересечение адиабатических автоионизационных состояний приводит к особенностям в зависимости $W_A(R)$ от R . Из рис. 14 видно, что особенности $W_R(R)$ имеют ту же природу. Характерно, что сила линии $S_{if}(R) = |\langle i | \mathbf{p}_e | f \rangle|^2$ имеет максимум примерно в той же области R , что и $W_A(R)$. Смещение максимума $W_R(R)$ в область малых R , найденное также в работе¹⁵⁵, связано с резким убыванием энергии излучения $E_{if}(R)$ с раздвижением ядер. Частоты $W_R(R)$ в HeH^+ достигают величин порядка $10^{10} - 10^{11} \text{ с}^{-1}$, а в N_2 уже $10^{12} - 10^{13} \text{ с}^{-1}$, что подтверждает сильную зависимость W_R от зарядов ядер квазимолекулы.

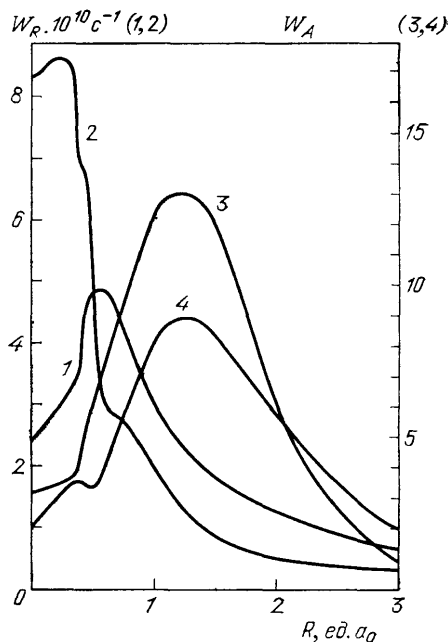


Рис. 14. Полные частоты радиационного распада $W_R(R)$ и оже-распада $W_A(R)$ (в ед. 10^{-14} с) в HeH^+ ¹⁵⁶. 1 — $W_R(1^1\Sigma^+)$, 2 — $W_R(2^1\Sigma^+)$, 3 — $W_A(1^1\Sigma^+)$, 4 — $W_A(2^1\Sigma^+)$

5. Экзотические квазимолекулы.

5.1. Сверхтяжелые системы и генерация позитронов. Большой интерес вызывает изучение сверхтяжелых атомов с $Z\alpha > 1$. Сверхтяжелые атомы позволяют исследовать свойства электронов в сильных электрических полях, создаваемых ядрами, установить пределы стабильности ядер с большим количеством протонов и нейтронов, в частности островков ядерной устойчивости для магических ядер.

При увеличении заряда ядра Z до так называемого критического значения Z_k энергия нижних уровней уменьшается настолько, что уровень $1s$ переходит границу континуума отрицательных энергий, и связанное состояние

$1s$ исчезает. При этом энергия уровня $E_s < -2/mc^2$, где m — масса электрона, $Z_K \gg 170$. Физически это означает, что в таком сильном электрическом поле вакуум становится неустойчивым относительно рождения электрон-позитронных пар. Если в таком атоме имеются вакансии на К-оболочке, то возможна генерация одного или двух позитронов в зависимости от числа вакансий. В обзоре¹⁵⁷ детально рассмотрены свойства вакуума и электронных оболочек ядер для $Z_K \alpha \gg 1$, исследованы различные механизмы генерации пар, энергетический спектр и вероятность испускания позитронов. Современная ядерная физика не имеет возможностей для получения таких ядер. Оригинальное решение этой проблемы, использующее квазимолекулярный механизм, предложено в работе¹⁵⁸. При сближении двух голых ядер, например ядер урана, при не слишком малом R кулоновское поле становится настолько сильным, что нижний $1s\sigma_{1/2}$ уровень квазимолекулы «ныряет» в континуум. Эта ситуация соответствует приближению слитого атома, когда электроны в квазимолекуле чувствуют поле суммарного заряда $Z = Z_1 + Z_2$. Необходимо отметить, что эта идея лежит в основе всех последующих работ по изучению явлений в сильных полях.

Было указано¹⁵⁹, что образование пар возможно и при менее жестких ограничениях, например при столкновении голого ядра Z_2 с атомом Z_1 при

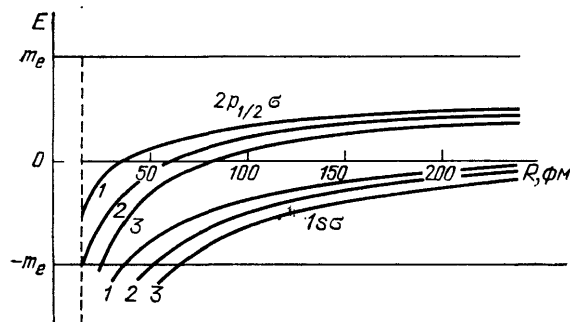


Рис. 15. Квазимолекулярная корреляционная диаграмма для различных сверхкритических квазимолекул¹⁶⁰. 1 — U — U, 2 — U — Cf, 3 — Cf — Cf

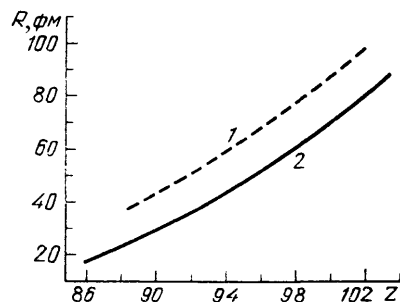


Рис. 16. Зависимость R_K от заряда Z сталкивающихся ядер для симметричных систем¹⁶⁰. 1 — вариационные расчеты, 2 — численное интегрирование

условии $Z_2 > Z_1$. В этом случае нижний уровень $1s\sigma$ формируется из незаполненной К-оболочки тяжелого ядра. В связи с квазимолекулярным способом получения Z_K встает задача решения релятивистской двухцентровой кулоновской задачи, т. е. получения энергетических термов электрона в поле двух ядер с зарядами Z_1 и Z_2 в зависимости от межъядерного расстояния. Зависимость энергии от R дает возможность для данной пары Z_1 и Z_2 определить R_K , при котором уровень попадает в континуум. Вычислению R_K в зависимости от заряда ядер для разных электронных уровней посвящены работы^{159–166}. На рис. 15 приведены уровни энергии электрона в поле двух центров с тремя комбинациями зарядов ядер Z_1 и Z_2 . Видно, что для $Z_1 = Z_2 = 98$ континуума достигает не только нижний уровень $1s\sigma$, но и уровень $2p\sigma_{1/2}$. На рис. 16 для $1s\sigma$ состояния построена зависимость R_K от заряда Z для симметричных столкновений. Расчеты указывают на почти линейную зависимость R_K от Z , причем данные вариационных расчетов^{159–164} систематически превышают данные, полученные прямым численным интегрированием уравнения Дирака^{165,166}.

Рассмотренный выше механизм спонтанного рождения пар за счет достижения критического поля в принципе не зависит от скорости сталкивающихся частиц и может происходить при очень малых энергиях, лишь бы ядра могли сблизиться на расстояние $R \leq R_K$. В области неадиабатичности возможна генерация позитронов за счет изменения кулоновского поля

ядер в процессе столкновения^{167–175}. При этом возможно образование пар до погружения уровня в континуум. Процессы спонтанного и стимулированного рождения позитронов когерентны. В связи с этим в работах^{170,171} предлагается рассматривать их как единое явление.

При изучении энергетического спектра позитронов, генерируемых в тяжелой квазимолекуле, были обнаружены пики¹⁷⁶, которые не могут быть объяснены в рамках спонтанного и стимулированного изменением поля распада вакуума. Спонтанный механизм приводит к очень узкому позитронному спектру^{177,178}, за счет стимулированного распада спектр сильно возрастает и уширяется^{167,169}. Пик, обнаруженный в работе¹⁷⁶, расположен при **бóльших** энергиях, но менее интенсивен. Для объяснения этих экспериментов предложен новый механизм генерации позитронов¹⁷⁹, аналогичный автоионизации в квазимолекуле при наличии вакансий во внутренних оболочках. Две вакансии на $1s\sigma$ оболочке заполняются электроном из более высокой оболочки, например $2s\sigma$, и электроном из континуума. При этом рождается и позитрон. Процесс энергетически разрешен, если

$$E_{2s\sigma}(R) - 2mc^2 - E_{(1s\sigma)^2}(R) \geq 0. \quad (5.1)$$

Анализ релятивистских корреляционных диаграмм указывает, что условие (5.1) выполняется при не слишком малых значениях R . Вероятность такого автоионизационного рождения позитрона составляет 25% от вероятности прямого перехода из континуума¹⁷⁹.

В низкоэнергетической части позитронного спектра был обнаружен узкий пик, ширина которого не согласуется с соотношением неопределенностей, если за ΔE принять ширину пика, а за Δt — время пребывания $1s\sigma$ -орбитали в области энергий ниже $E_{1s\sigma} - mc^2$.

В работе²³⁵ было предложено объяснение этого, связанное с образованием своеобразной позитронной квазимолекулы, в которой время пребывания позитрона (если он доживает до этого состояния) увеличивается. Позитрон как бы «застревает» на некоторое время между двумя отталкивательными центрами, подобно тому как излучение задерживается между двумя зеркалами. Другим возможным объяснением является рождение и последующий распад в таких столкновениях новой элементарной частицы — «аксиона»¹⁸⁰.

Подробно явления в сильных полях изложены в обзорах^{181,182}.

5.2. Мезоквазимолекулы. В последнее время резко возрос интерес к изучению мезоатомных и мезомолекулярных процессов. Это связано с предсказанием¹⁸³ и экспериментальным обнаружением¹⁸⁴ высоковозбужденного связанного состояния в мезомолекулах $dd\mu$ и $dt\mu$. Скорость резонансного образования мезомолекулы $dt\mu$ $\lambda_{dt\mu} \approx 10^8$ с⁻¹ такова, что один μ -мезон может осуществить катализ порядка сотни реакций синтеза ядер дейтерия и трития. Подробный обзор работ по мезонному катализу выполнен в работе¹⁸⁵.

Для динамики катализа необходимо знать время захвата мезона в дискретный спектр и время спуска в основное состояние. Считается, что свободный термализованный μ -мезон захватывается на высоковозбужденные уровни дейтерия с главным квантовым числом $n = 14$ и за счет каскада оже- и радиационных переходов оказывается в основном состоянии. При этом за счет взаимодействия с соседними атомами происходит штарковское смешивание уровней мезоатома, увеличивающее скорость радиационных переходов и внешний оже-переход. Расчеты времени каскадов в мезоатомах производились в работах^{186,187}. Между тем имеются экспериментальные данные¹⁸⁸, что захват мезона в основное состояние и переходы во внешних оболочках происходят в квазимолекуле. В связи с этим представляет интерес исследование влияния квазимолекулярных эффектов на мезонные переходы. Первая попытка была предпринята в работе¹⁸⁹, где были рассчитаны оже-

переходы в квазимолекуле, состоящей из двух дейтонов на расстоянии R друг от друга, мезона в высоковозбужденном состоянии с $n = 14$ и электрона в основном состоянии $1s\sigma$. Из этого состояния энергетически разрешен переход на уровень с $n = 7$, а с увеличением R — и на $n = 8$.

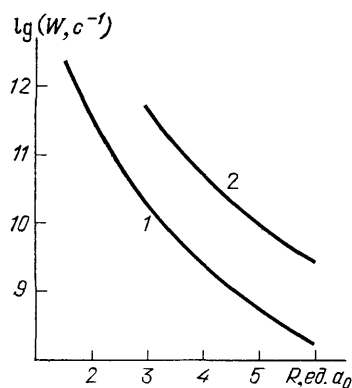


Рис. 17. Частоты оже-переходов с высоковозбужденных состояний квазимолекулы (ddep) ¹⁸⁹. 1 — $n = 14 \rightarrow n = 7$, 2 — $n = 14 \rightarrow n = 8$

На рис. 17 представлены зависимости $W(R)$ для переходов $n = 14 \rightarrow n = 7$ (1) и $n = 14 \rightarrow n = 8$ (2). Сильная зависимость от R указывает на важность учета переходов в квазимолекуле. В работе ¹⁸⁹ рассмотрена лишь начальная стадия каскада. Представляется актуальным в рамках квазимолекулярного перехода рассмотреть весь процесс захвата и девозбуждения мезона.

5.3. Квазимолекулы и деление ядер. Квазимолекулярный подход находит применение даже в такой, казалось бы, далекой области, как деление ядер. При изучении «мгновенного» деления ядра мезоатома мюоном, совершающим переход $2p - 1s$, возникает вопрос: чему равна

вероятность обнаружить мюон на легком или тяжелом осколках ¹⁹⁰? Эта типично квазимолекулярная задача решается с помощью формулы Демкова ¹⁵. Оказывается, что с вероятностью 99% он остается в основном состоянии тяжелого осколка.

При делении ядер, которое можно считать «половинным столкновением», возникает задача о зарядовом составе осколков, которые представляют собой 20—22-зарядные ионы. Так как скорость осколков мала по сравнению со скоростью внутренних электронов, то проблема рассматривается в рамках квазимолекулярного приближения. В работах ^{191,192} зарядовый состав рассматривался в приближении «внезапной встряски», основанном на предположении ¹⁹³, что электроны в исходном ядре урана, чьи орбитальные скорости $v_U^{эл}$ меньше, чем скорость тяжелого осколка v_T , полностью отрываются при делении ядер. Однако в этом подходе не рассматриваются внутренние оболочки, и степень ионизации оказывается заниженной.

В работе ¹⁹⁴ для решения этой задачи использовалась диабетическая корреляционная диаграмма для квазимолекулы $Sr + Xe$ (наиболее вероятные продукты деления ядра ²³⁵U). Из рассмотрения диаграммы следует, что часть электронов, для которых $v_U^{эл} > v_T$, также отрывается, поскольку их термы коррелируют с высоковозбужденными состояниями осколков, для которых $v_{д,т}^{эл} \ll v_{д,т}$. Суммарный заряд осколков $g = 46$ хорошо согласуется с экспериментальной величиной $g \approx 42$ ¹⁹⁵. Анализ корреляционной диаграммы позволяет сделать вывод о почти единичной вероятности образования двух вакансий в M -оболочке тяжелого осколка, 50% образования вакансии в L -оболочке легкого осколка. Обнаружение рентгеновского излучения из M -оболочки явилось бы экспериментальным подтверждением квазимолекулярного механизма образования вакансий при делении ядер.

При столкновениях с большими энергиями в области преобладания ядерных сил происходит образование ядерных молекул ^{196,197}. Эти короткоживущие состояния приводят к образованию характерных резонансов в сечениях столкновений. Было бы интересно исследовать и такой тип квазимолекулы.

6. Квазимолекулярное излучение. В 1972 г. в работе ¹⁹ при изучении фотонных спектров, полученных в медленных столкновениях $Ar^+ - Ar$, была обнаружена непрерывная полоса рентгеновского излучения, не совпадаю-

щая с положениями характеристических атомных спектров. Уже в этой первой работе авторы указали на квазимолекулу как на источник формирования непрерывного спектра, привлекли корреляционные диаграммы и механизм двойного соударения для объяснения свойств наблюдаемого излучения. Интерес к квазимолекулярному рентгеновскому излучению связан с возможностью получения информации об энергетических уровнях внутренних оболочек тяжелых и сверхтяжелых квазимолекул и квазиатомов. Интенсивному развитию этой области исследований способствовало строительство ускорителей тяжелых ионов в ОИЯИ и GSI, на которых были достигнуты суммарные заряды сталкивающихся ядер $Z = Z_1 + Z_2 \gtrsim 100$. Существует ряд обзоров ^{153,198–200}, посвященных различным аспектам непрерывного рентгеновского излучения.

6.1. Вакансии во внутренних оболочках. Как указывалось ранее, квазимолекулярный механизм возбуждения приводит к образованию вакансий во внутренних оболочках. Эти вакансии заполняются за счет безызлучательных переходов типа Оже и радиационных переходов. Первые преобладают для легких систем и внешних оболочек. Для возникновения излучения необходимо, чтобы время столкновения было сравнимо или больше времени жизни вакансии относительно радиационного перехода. Поэтому квазимолекулярное излучение можно ожидать для столкновений средних и тяжелых атомов с возбуждением внутренних оболочек ¹⁵³, так как вероятность излучения быстро растет с увеличением зарядов ядер и энергии излучения.

В ряде работ ^{19,201,202}, где изучалось квазимолекулярное излучение при бомбардировке твердых мишеней, была обнаружена зависимость сечения излучения от плотности мишени. Для объяснения этой зависимости был предложен механизм двойного столкновения, «карамболя» ¹⁹. Налетающий атом в первом столкновении получает вакансию во внутренней оболочке, которая затем распадается в процессе второго столкновения. Доля f ионов, имеющих вакансию, например, на L-оболочке, в твердом теле равна

$$f = \sigma_L d v \tau_L (AM)^{-1} \quad (6.1)$$

где σ_L — сечение образования L-вакансии, AM число атомов мишени в единице объема, v — скорость иона, τ_L — время жизни L-вакансии в бомбардирующей частице. Эта доля может быть достаточно велика. Оценки показывают ¹⁵³, что 10–20% ионов (при 200 кэВ) имеют вакансию на L-оболочке после прохождения через тонкую пленку. Механизм двойного столкновения эффективен для вакансий, время жизни которых относительно радиационных переходов превышает время столкновения. Как указано в работе ¹⁵³, механизм двойного столкновения преобладает для элементов первого периода в излучении K-оболочки. Для элементов второго и, возможно, третьего периода K — МО-излучение имеет место для столкновений с участием атомов отдачи. Для более тяжелых систем механизм двойного столкновения характерен для L- и M — МО-излучения. Теория квазимолекулярного излучения, основанная на этом механизме, дана в работах ^{155,203}.

С ростом зарядов ядер Z_1 и Z_2 сталкивающихся атомов уменьшается время жизни вакансий на внутренних оболочках. Это время становится сравнимо со временем столкновения. Для таких систем применим механизм однократного столкновения, при котором вакансия распадается в процессе того же столкновения, где и рождается. В работе ²⁰⁴ утверждается, что однократный механизм применим для сильно асимметричных квазимолекул и для столкновений тяжелых атомов ($Z_1, Z_2 > 50$). В работе ²⁰⁵ развита теория этого механизма.

6.2. С п е к т р и з л у ч е н и я . Квазимолекулярное излучение наблюдается в форме непрерывной полосы в энергетическом спектре фотонов

(рис. 18) ¹⁵³. Это связано с непрерывной зависимостью энергии излучения от расстояния между сталкивающимися атомами. Если время столкновения

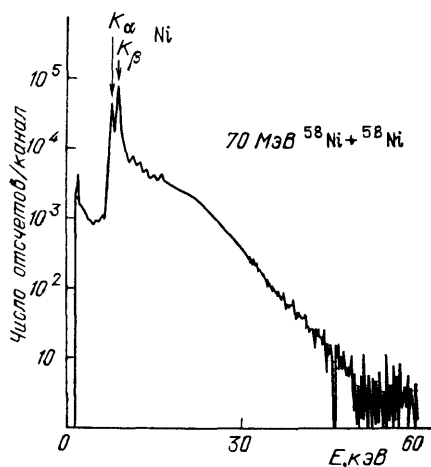


Рис. 18. Спектр излучения для столкновений Ni — Ni с энергией 70 мэВ ¹⁵³

достаточно велико по сравнению со временем излучательного распада вакансии, то излучение возможно при любом межъядерном расстоянии R . В квазистатическом приближении энергия квазимолекулярного излучения $E(R)$ просто равна разности энергий термов начального и конечного состояний при данном R . Анализ корреляционных диаграмм позволяет выделить характерные области спектра. Так, наибольших энергий излучения следует ожидать при малых R в пределе объединенного атома. В работах ^{201, 206, 207} с увеличением скорости столкновения наблюдался сдвиг спектра в сторону больших энергий. Корреляционные диаграммы, используемые для расчета спектров излучения, получены в работах ^{43, 45, 208, 209}. В рамках двухстолкно-

вительного механизма образования квазимолекулярного излучения в работе ¹⁵⁵ получено выражение для спектра:

$$\frac{d\sigma}{dE} = 4\pi R_0^2 \left(\frac{dE}{dR} \right)^{-1} \Big|_{R=R_0} \left(1 - \frac{U(R_0)}{T} \right)^{1/2} (v\tau_R(R_0))^{-1}, \quad (6.2)$$

где R_0 — расстояние, соответствующее энергии E , v — скорость иона, $U(R_0)$ — потенциал взаимодействия в R_0 , T — энергия иона, τ_R — радиационное время жизни вакансии. Отсюда видно, что спектр имеет особенности при $dE/dR \approx 0$, т. е. для энергий переходов, которые слабо зависят от R . Спектр круто обрывается в сторону больших E в точке поворота (при $U(R) = T$). Реальный спектр уширен в классически запрещенную область за счет динамики столкновения. Это явление — эффект столкновительного уширения — будет рассмотрено ниже. Для расчета спектра в классически запрещенной области использовалось приближение Эйри ^{199, 210}. В рамках однократного механизма форма спектра рассчитывалась в работах ^{204, 205, 211}.

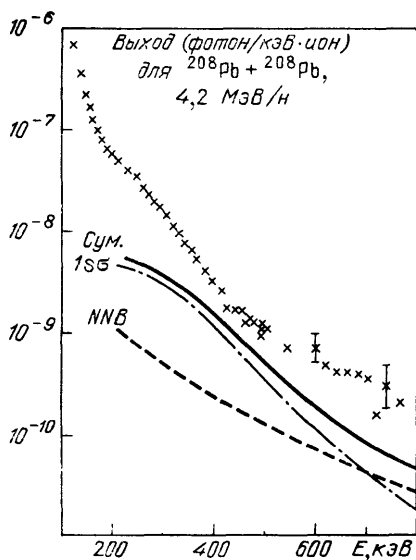


Рис. 19. Выход излучения для 4,2 МэВ/нуклон столкновений ²⁰⁸Pb — ²⁰⁸Pb. Значки — эксперимент ²¹², линии — теория ²¹⁴, включающая возбуждение $1s\sigma$ -орбитали и ядерно-ядерное тормозное излучение

периментальных данных. На рис. 19 представлены экспериментальные данные по выходу излучения для 4,2 МэВ/нуклон столкновений Pb — Pb ^{212, 213}

Кроме собственно квазимолекулярного излучения, вклад в непрерывную составляющую вносят процессы электронного и ядерного тормозного излучения, радиационного захвата электрона и ионизация с излучением. Учет этих эффектов необходим для корректного сравнения теоретических и экс-

и теоретические кривые ²¹⁴ с учетом вклада ядерно-ядерного тормозного излучения. Влияние этого эффекта возрастает с увеличением энергий квантов.

Как указывалось при рассмотрении формулы (6.2), слабая зависимость энергии перехода E от R приводит к наличию пикообразной структуры в спектре. Рассмотрение корреляционных диаграмм показывает, что такая ситуация возможна в области малых R . Если радиус электронной оболочки n в объединенном атоме $r_n \gg 2R$, то для электронов из этой и последующих оболочек в квазимолекуле применимо квазиатомное приближение, т. е. эти оболочки рассматриваются в объединенном атоме с зарядом $Z = Z_1 + Z_2$. Условия формирования квазиатомов накладывают ограничения на скорость столкновения v ¹⁵³:

$$0,02 \leq \frac{v}{v_n} \leq 0,16, \quad (6.3)$$

где v_n — орбитальная скорость на n -оболочке объединенного атома. Квазиатомное излучение дает информацию об уровнях сверхтяжелых атомов, в

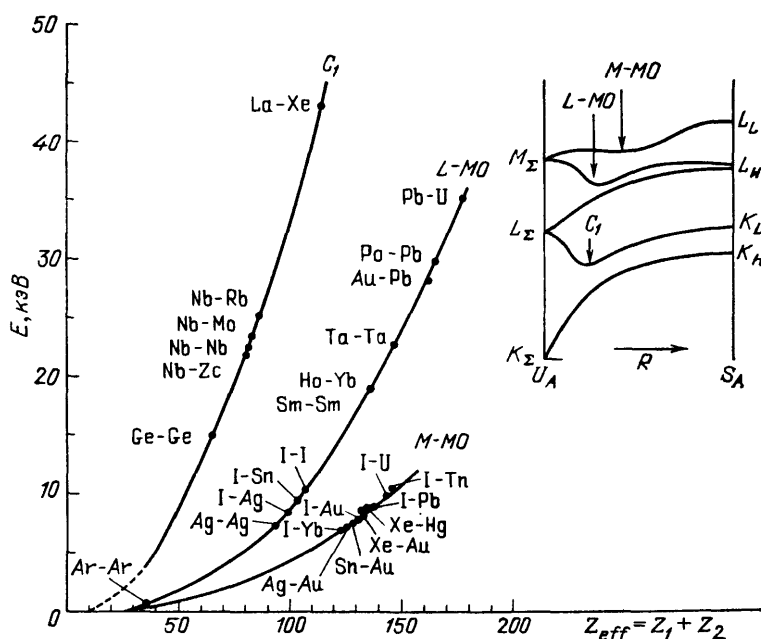


Рис. 20. Энергия характерных структур в спектре квазимолекулярного излучения как функция суммарного заряда ядер Z_{eff} ¹⁵³

том числе не существующих в природе. На рис. 20 ¹⁵³ приведены энергии характерных структур в квазимолекулярном излучении в зависимости от суммарного заряда Z_{eff} сталкивающихся атомов. Имеющиеся данные разбиваются на группы, соответствующие переходу на определенную оболочку. Это указывает на то, что особенности в спектре связаны с общей для всех Z зависимостью энергии данной оболочки от R . Наиболее явные квазиатомные спектры характерны для переходов на М-оболочку ^{201,208,215,216}. Для квазиатомного излучения время столкновения $\tau_{\text{coll}} \sim r_n/v$ велико вблизи порога, поэтому квазиатомные пики в спектре увеличиваются с уменьшением энергии столкновения ²¹⁷.

Сильная зависимость энергии уровня $1s\sigma$ $E_{1s\sigma}$ от R и эффект столкновительного уширения не позволяют извлечь данные о нем из спектров. Однако существует возможность определения $E_{1s\sigma}(R)$ из данных по вероятности возбуждения $1s\sigma$ -уровня при столкновении с фиксированным параметром, удара ²⁰⁰.

6.3. Анизотропия излучения. В работах^{218–221} была обнаружена угловая анизотропия квазимолекулярного излучения. На рис. 21¹⁵³ приведены данные по угловой зависимости интенсивности излучения. Максимум интенсивности соответствует направлению, перпендикулярному оси

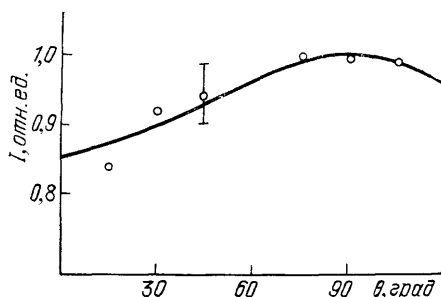


Рис. 21. Угловая зависимость интенсивности квазимолекулярного излучения на М-оболочку в столкновениях I — Au с энергией 11 мэВ¹⁵³. Кривая описывается формулой $I(\theta) = 0,85 + 0,15 \sin^2 \theta$ ¹⁵³

пучка ионов. Для всех углов максимум анизотропии расположен вблизи энергии перехода в объединенном атоме²¹⁸. Это дает возможность извлекать данные об уровнях сверхтяжелых атомов из измерений анизотропии излучения разных оболочек квазимолекулы^{214, 222–224}.

Теории углового распределения излучения посвящено большое число работ^{223–231}. В работах^{223–225} предполагалось, что анизотропия связана с индуцированными радиационными переходами²⁰¹, возникающими за счет вращения межъядерной оси во время столкновения. Авторы работ^{226–231} рассматривают сильное кориолисово взаимодействие между σ - и π -орбиталями, которое вызывает различное заселение электронных подоболочек, дающих вклад в радиационные переходы. Оба механизма согласуются с экспериментальными данными¹⁵³, но какому из них отдать предпочтение, пока неясно.

6.4. Столкновительное уширение. Как указывалось ранее, формула (6.2) предсказывает крутой спад спектра при $E > E(R_0)$. В экспериментах, однако, наблюдается экспоненциально спадающий с ростом «хвост» распределения, получивший название столкновительного уширения. Появление фотонов с энергией больше классически разрешенной связано с тем, что излучение происходит в процессе столкновения, и из-за принципа неопределенности Гейзенберга энергия излучения зависит от скорости столкновения. Эффект столкновительного уширения не дает возможности извлечь данные по энергиям 1s уровня объединенного атома с $Z = Z_1 + Z_2$ из спектров¹⁵³. Столкновительное уширение принято характеризовать полушириной высокоэнергетической части распределения излучения H . Если спектр в запрещенной области представить в виде^{232, 233}

$$\frac{d\sigma}{dE} \sim E e^{-E/2\Gamma}, \quad (6.4)$$

то H имеет вид

$$H = (2 \ln 2) \Gamma. \quad (6.5)$$

Большой интерес представляет изучение зависимости H от скорости столкновения v . Полученные результаты описываются общей формулой

$$H \sim v^a. \quad (6.6)$$

Значение a варьируется в разных работах: $a = 1/2$ ²⁰³, 1 ²³², $2/3$ ²³⁴ и $0,59 \pm 0,03$ ²³³, этот результат получен из анализа экспериментальных данных. При другом способе обработки в работе¹⁹⁹ получено $a = 0,66$, что согласуется с работой²³⁴.

7. Заключение. Приведенный выше краткий обзор развития представлений о квазимолекулах и квазимолекулярных процессах, их применения

в различных задачах показывает, что это новое, быстро развивающееся направление в атомной физике очень плодотворно.

Квазимолекулярное рассмотрение оказалось не только полезным, но и единственно возможным в стремительно расширяющейся области исследования взаимодействия многозарядных ионов с веществом. Оно совершенно необходимо в радиационной физике, химии горячих атомов, радиационной биофизике, где взаимодействие медленных многозарядных атомов отдачи с атомами и молекулами является определяющим.

Квазимолекулярные эффекты проявляются при прохождении ионов через твердое тело и по его поверхности, в явлениях каналирования, ионной имплантации, распыления твердых тел и их разрушения тяжелыми ионами и осколками деления ядер, в beam-foil-спектроскопии и ионной оже-спектроскопии.

Мы стоим на пороге исследования явлений, вызываемых медленными высокозарядными ионами,— уже получены полностью лишённые электронов ядра криптона, ксенона и даже урана, энергия которых не превосходит 100 эВ на единицу заряда. Еще не исследованное взаимодействие таких ионов с атомами вещества должно быть существенно квазимолекулярным.

На очереди исследование многоэлектронных квазимолекулярных эффектов и многочастичных квазимолекулярных дробных оже-переходов, многоатомных квазимолекул, изучение свойств трансурановых элементов путем образования сверхтяжелых квазимолекул и исследование процессов в электронных оболочках делящихся ядер.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- ¹ Mu l l i k e n R. S.//Phys. Rev. 1928. V. 32. P. 186.
- ² Weizel W., B e e c k O.//Zs. Phys. 1932. Bd 76. S. 250.
- ³ St ü c k e l b e r g E. C. G.//Helv. Phys. Acta. 1932. V. 5. P. 369.
- ⁴ L a n d a u L.//Phys. Zs. Sowjet. 1932. Bd 1. S. 426.
- ⁵ Z e n e r C.//Proc. Roy. Soc. Ser. A. 1932. V. 137. P. 626.
- ⁶ C a r b o n e R. J., F u l s E. N., E v e r h a r t E.//Phys. Rev. 1956. V. 102. P. 1524.
Z i e m b a F. P., E v e r h a r t E.//Phys. Rev. Lett. 1959. V. 2. P. 299.
M o r g a n G. H., E v e r h a r t E.//Phys. Rev. 1962. V. 128. P. 667.
E v e r h a r t E.//Ibidem. 1965. V. 132. P. 2083.
- ⁷ E v e r h a r t E., K e s s e l Q. C.//Phys. Rev. Lett. 1965. V. 14. P. 247.
- ⁸ Ф е д о р е н к о Н. В., А ф р о с и м о в В. В.//ЖТФ. 1956. Т. 26. С. 1941; 1957. Т. 27. С. 2557.
Ф е д о р е н к о Н. В.//УФН. 1959. Т. 68. С. 481.
А ф р о с и м о в В. В., Г о р д е е в Ю. С., П а н о в М. Н., Ф е д о р е н к о Н. В.//ЖТФ. 1964. Т. 34. С. 1613; 1966. Т. 36. С. 123.
- ⁹ B r a n d t W., L a u b e r t R.//Phys. Rev. Lett. 1970. V. 24. P. 1037.
- ¹⁰ L i c h t e n W.//Phys. Rev. 1963. V. 131. P. 229.
- ¹¹ F a n o U., L i c h t e n W.//Phys. Rev. Lett. 1965. V. 14. P. 627.
- ¹² К и ш и н е в с к и й Л. М., П а р и л и с Э. С.//ЖТФ. 1968. Т. 38. С. 760; ДАН УзССР. 1966. Т. 9. С. 10.
- ¹³ N i k u l i n V. K.//Phys. Lett. 1966. V. 23. P. 452.
- ¹⁴ С м и р н о в Б. М.//ЖЭТФ. 1967. Т. 53. С. 1400.
- ¹⁵ K i s h i n e v s k y L. M., P a r i l i s E. S.//Proc. of the 5th Intern. Conference on Physics of Electronic and Atomic Collisions.— Leningrad, 1967.— P. 100.
- ¹⁶ Д е м к о в Ю. Н.//ЖЭТФ. 1963. Т. 45. С. 195; Вопросы теории атомных столкновений.— Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1972.— Т. 1.
- ¹⁷ А ф р о с и м о в В. В., Г о р д е е в Ю. С., З и н о в ъ е в А. Н., Р а с у л о в Д. Х., Ш е р г и н А. П.//Письма ЖЭТФ. 1976. Т. 24. С. 33.
А ф р о с и м о в В. В., М е с х и Г. Г., Ц а р е в Н. Н., Ш е р г и н А. П.//Письма ЖТФ. 1978. Т. 5. С. 897; 1980. Т. 31. С. 729; ЖЭТФ. 1983. Т. 84. С. 454.
А с а т р я н В. Р., Ш е р г и н А. П.//Письма ЖЭТФ. 1986. Т. 44. С. 454.
- ¹⁸ M u l l i k e n R. S.//Chem. Phys. Lett. 1972. V. 14. P. 137.
- ¹⁹ S a r i s F. W., G o r d e e v Y u. S.//Europhys. News. 1980. V. 11. P. 4.
- ²⁰ S a r i s F. W., V a n d e r W e g W. F., T a w a r a H., L a u b e r t R.//Phys. Rev. Lett. 1972. V. 28. P. 717.
- ²¹ Ф и р с о в О. Б.//ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 1464; Т. 33. С. 696; Rad. Effects. 1982, V. 61. P. 73.
- ²² A b r a h a m s o n A. A.//Phys. Rev. 1969. V. 178. P. 76.

- ²¹ Фирсов О. Б.//ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1517.
Кишиневский Л. М.//Изв. АН. СССР. Сер. физ. 1962. Т. 26. С. 1410.
Cheshire I., Dearneley G., Poate J. P.//Phys. Lett. Ser. A. 1968. V. 27, P. 304.
Комаров F. F., Kumakhov M. A.//Phys. Stat. Sol. Ser. b. 1973. V. 58. P. 389.
Cruir S. A., Vargas-Aburto C., Brice D. K., Alonso E. V., Armour D. G.//Phys. Rev. 1983. V. 27. P. 2403.
- ²² Баклицкий Б. Е., Парилис Э. С.//ЖТФ. 1986. Т. 56. С. 27.
Russek A., Thomas M. T.//Phys. Rev. 1958. V. 109. P. 2015; 1959. V. 114. P. 1538.
Russek A.//Ibidem. 1963. V. 132. P. 246.
- ²³ Никитин Е. Е., Уманский С. Я. Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях.—М.: Атомиздат, 1979.
- ²⁴ Madison D. H., Merzbacher E.//Atomic Inner Shell Processes.—New York, 1975.—V. 1. P. 1.
- ²⁶ Eichler J., Wille U.//Proc. of the 10th Intern. Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions.—Amsterdam: North-Holland, 1978.—V. 1. P. 331.
- ²⁶ Комаров И. В., Пономарев Л. И., Славянов С. Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции.—М.: Наука, 1976.
- ²⁷ Трускова Н. Ф. Препринт ОИЯИ. РН-10207.—Дубна, 1976; Препринт ОИЯИ РН-11218.—Дубна, 1978; Препринт ОИЯИ РИ-11269.—Дубна, 1978.
- ²⁸ Winter T. G., Dunkan M. D., Lane N. F.//J. Phys. Ser. B. 1977. V. 10. P. 285.
- ²⁹ Соловьев Е. А.//ЖЭТФ. 1981. Т. 81. С. 1681.
- ³⁰ Овчинников С. Ю., Соловьев Е. А.//ЖЭТФ. 1986. Т. 90. С. 921.
- ³¹ Соловьев Е. А.//Ibidem. С. 1165.
- ³² Овчинников С. Ю., Соловьев Е. А.//Ibidem. Т. 91. С. 477.
- ³³ Thulstrup E. W., Johansen H.//Phys. Rev. Ser. A. 1972. V. 6. P. 206,
- ³⁴ Larkins F. P.//J. Phys. Ser. B. 1972. V. 5. P. 571.
- ³⁵ Briggs J. S., Hayns M. R.//Ibidem. 1973. V. 6. P. 514.
- ³⁶ Taulbjerg K., Briggs J. S.//Ibidem. 1975. V. 8. P. 1895.
- ³⁷ Masias A., Riera A.//Ibidem. 1976. V. 9. P. 497.
- ³⁸ Hartung H., Fricke B., Sepp W.-D., Sengler W. et al.//Ibidem. 1985. V. 18. P. L433.
- ³⁹ Fricke B., Sepp W.-D.//Ibidem. 1981. V. 14. P. 549.
- ⁴⁰ Teller E., Sahlin H. L.//Physical Chemistry.—New York, 1970.—V. 5. P. 35.
- ⁴¹ Aubert M., Bessis N., Bessis G.//Phys. Rev. Ser. A. 1974. V. 10. P. 51; 1975. V. 12. P. 2298.
- ⁴² Aubert M., Le Sech C.//Phys. Rev. Ser. A. 1976. V. 13. P. 632.
- ⁴³ Eichler J., Wille U.//Ibidem. 1975. V. 11. P. 1973.
- ⁴⁴ Gross E., Dreizler R. M.//Phys. Lett. Ser. A. 1976. V. 57. P. 131.
- ⁴⁵ Eichler J., Wille U., Fastrup B., Taulbjerg K.//Phys. Rev. Ser. A. 1976. V. 14. P. 707.
- ⁴⁶ Aguilar J., Murez C., Nakamura H.//Chem. Phys. Lett. 1978. V. 53, P. 174.
- ⁴⁷ Никулин В. К., Гушина Н. А.//ЖТФ. 1978. Т. 48. С. 13.
- ⁴⁸ Nikulin V. K., Guschina N. A.//J. Phys. Ser. B. 1978. V. 11. P. 3553.
- ⁴⁹ Никулин В. К., Самойлов А. В. Препринт ФТИ АН СССР № 720.—Ленинград, 1981.
- ⁵⁰ Гушина Н. А., Никулин В. К., Самойлов А. В., Царев Ю. Н. Препринт ФТИ АН СССР № 811.—Ленинград, 1983.
- ⁵¹ Bell K. L.//J. Phys. Ser. B. 1970. V. 3. P. 1308.
- ⁶² Bottcher C. B., Docken K.//J. Phys. Ser. B. 1974. V. 7. P. 5.
- ⁶³ Miller W. H., Slocomb C. A., Schaefer H. F.//J. Chem. Phys. 1972, V. 56. P. 1347.
- ⁵⁴ Андреев Е. А., Смирнов Б. М.//Опт. и спектр. 1978. Т. 45. С. 226.
- ⁶⁵ Sato H., Hara S.//J. Phys. Ser. B. 1980. V. 13. P. 4577.
- ⁵⁶ Кишиневский Л. М., Краков Б. Г., Парилис Э. С.//ЖТФ. 1983. Т. 53. С. 1456.
- ⁵⁷ Von Neumann J., Wigner E.//Phys. Zs. 1929. Bd 30. S. 467.
- ⁵⁸ Teller E.//J. Phys. Chem. 1937. V. 41. P. 109.
- ⁵⁹ Аллилуев С. П., Матвеев А. В.//ЖЭТФ. 1966. Т. 51. С. 1873.
- ⁶⁰ Coulson C. A., Joseph A.//Intern. J. Quant Chem. 1967. V. 1. P. 337.
- ⁶¹ Erikson H. A., Hill E. L.//Phys. Rev. 1949. V. 75. P. 29.
- ⁶² Кривченков В. Д., Либерман М. А.//Изв. вузов. СССР. Сер. «Физика». 1968. Т. 8. С. 23.
- ⁶³ Morse P. M., Stückelberg E. C.//Phys. Rev. 1929. V. 33. P. 932.

- ⁶⁴ Герштейн С. С., Кривченков В. Д.//ЖЭТФ. 1961. Т. 40. С. 1491.
- ⁶⁵ Barat M., Lichten W.//Phys. Rev. Ser. A. 1972. V. 6. P. 211.
- ⁶⁶ Lichten W.//Ibidem. 1967. V. 164. P. 131.
- ⁶⁷ Ermler C., Mulliken R., Wahl A.//J. Chem. Phys. 1977. V. 66. P. 3031.
- ⁶⁸ Ellison F. O., Wu A. A.//J. Chem. Phys. 1967. V. 47. P. 4408.
- ⁶⁹ Sidis V., Lefebvre-Brion H.//J. Phys. Ser. B. 1971. V. 4. P. 1040.
- ⁷⁰ Sidis V., Barat M., Dhuicq D.//Ibidem. 1975. V. 8. P. 474.
- ⁷¹ Albat R., Gruen N., Wirsam B.//Ibidem. P. 2520.
- ⁷² Brenot J. C., Dhuicq D., Gauyacq J. P., Pommier J. et al.//Phys. Rev. Ser. A. 1975. V. 11. P. 1933.
- ⁷³ Eichler J., Wille U.//Phys. Rev. Lett. 1974. V. 33. P. 56.
- ⁷⁴ Kaufmann P., Wille U.//Zs. Phys. Ser. A. 1976. V. 279. P. 259.
- ⁷⁵ Fritsch W., Wille U.//J. Phys. Ser. B. 1977. V. 10. P. L165.
- ⁷⁶ Eichler J.//Phys. Rev. Lett. 1978. V. 40. P. 1560.
- ⁷⁷ Lavrov V. M.//²⁵—V. 1. P. 10.
- ⁷⁸ Кереселидзе Т. М., Киккиани Б. И.//ЖЭТФ. 1984. Т. 87. С. 741.
- ⁷⁹ Дубровский Г. В.//Физика электронных и атомных столкновений.— Ленинград, 1980.—С. 15.
- ⁸⁰ Briggs J. S.//Rep. Prog. Phys. 1976. V. 39. P. 217.
- ⁸¹ Lichten W.//J. Phys. Chem. 1980. V. 84. P. 2102.
- ⁸² Falcon C., Masias A., Riera A., Sahlin A.//J. Phys. Ser. B. 1981. V. 14. P. 1983.
- ⁸³ Kita S., Izawa M., Hasegawa T., Inouye H.//Ibidem. 1984. V. 17. P. L885.
- ⁸⁴ Meyerhof W. E., Ruetschi A., Stoller Ch., Stöckli M. et al.//Phys. Rev. Ser. A. 1979. V. 20. P. 154.
- ⁸⁵ Быдин Ю. Ф., Демков Ю. Н.//УФН. 1982. Т. 137. С. 377.
- ⁸⁶ Демков Ю. Н., Ошеров В. И.//ЖЭТФ. 1967. Т. 53. С. 1589.
- ⁸⁷ Демков Ю. Н., Комаров И. В.//ЖЭТФ. 1966. Т. 50. С. 286.
- ⁸⁸ Асатрян В. Р., Овчинников С. Ю., Шергин А. П.//III научный семинар «Автоионизационные явления в атомах».— М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986.—С. 16.
- ⁸⁹ Ovchinnikov S. Yu., Gordeev Yu. S., Zinoviev A. N.//Proc. of the 12th Intern. Conference on the Physics of Electronic and Atomic collisions.— Gatlinburg, 1981.—P. 900.
- ⁹⁰ Woerlee P. H., Gordeev Yu. S., de Waard H., Saris F. W.//J. Phys. Ser. B. 1981. V. 14. P. 527.
- ⁹¹ Асатрян В. Р., Афросимов В. В., Гордеев Ю. С., Шергин А. П.//⁸⁸—С. 18.
- ⁹² Смирнов Б. М.//УФН. 1981. Т. 133. С. 569.
- ⁹³ Парилис Э. С. Эффект Оже.—Ташкент: Фан, 1969.
- ⁹⁴ Nakamura H.//J. Phys. Soc. Japan. 1969. V. 26. P. 1473.
- ⁹⁵ Takagi H., Nakamura H.//Phys. Rev. Ser. A. 1983. V. 27. P. 691.
- ⁹⁶ Пономарев Л. И., Пузынин И. В., Пузынина Т. П. Препринт ОИЯИ Р4-8884.—Дубна. 1975.
- ⁹⁷ Schneider B. I., Collins L. A.//J. Phys. Ser. B. 1981. V. 14. P. L101.
- ⁹⁸ Collins L. A., Schneider B. I.//Phys. Rev. Ser. A. 1981. V. 24. P. 1264, 2387; 1983. V. 27. P. 101.
- ⁹⁹ Simon B.//Phys. Lett. Ser. A. 1971. V. 36. P. 23.
- ¹⁰⁰ Moiseyev N., Corcoran C.//Phys. Rev. Ser. A. 1979. V. 20. P. 814.
- ¹⁰¹ Moiseyev N.//Mol. Phys. 1981. V. 42. P. 129.
- ¹⁰² Froelich P., Hehenberger M., Brändas E.//Intern. J. Quant. Chem. 1977. V. 11. P. 295.
- ¹⁰³ Aubert-Frecon M., LeSech C.//J. Chem. Phys. 1981. V. 74. P. 2931.
- ¹⁰⁴ LeSech C., Aubert-Frecon M.//J. Phys. Ser. B. 1982. V. 15. P. L135.
- ¹⁰⁵ Aubert-Frecon M., Ceyzeriat P., Jorus A. M., LeSech C.//Ibidem. 1984. V. 17. P. L7.
- ¹⁰⁶ Eliezer I., Taylor H. S., Williams J. K.//J. Chem. Phys. 1967. V. 47. P. 2165.
- ¹⁰⁷ Hazi A. U., Taylor H. S.//Phys. Rev. Ser. A. 1970. V. 11. P. 1109.
- ¹⁰⁸ Taylor H. S., Hazi A. U.//Ibidem. 1976. V. 14. P. 2071.
- ¹⁰⁹ Altic P. L., Moore E. N.//Phys. Rev. 1966. V. 147. P. 59.
- ¹¹⁰ Lipsky L., Russek A.//Ibidem. V. 142. P. 59.
- ¹¹¹ Балашов В. В., Гришанова С. И., Круглова И. М., Сенашенко В. С.//Опт. и спектр. 1970. Т. 28. С. 839.
- ¹¹² Feshbach H.//Ann. of Phys. 1962. V. 19. P. 287.

- ¹¹³ O'Malley T. F., Geltman S.//Phys. Rev. Ser. A. 1965. V. 137. P. 1344.
- ¹¹⁴ Сенашенко В. С. Физика электронных и атомных столкн.— М., 1978.— С. 92
- ¹¹⁵ Burke P. G., Smith K.//Rev. Mod. Phys. 1962. V. 34. P. 458.
- ¹¹⁶ Burke P. G. Autoionization.—Baltimore, USA, 1966.—P. 77.
- ¹¹⁷ Fano U.//Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 1866.
- ¹¹⁸ Fano U., Cooper J. W.//Ibidem. Ser. A. 1965. V. 137. P. 1364.
- ¹¹⁹ Bates D. R., Bell K. L., Kingston A. E.//Proc. Phys. Soc. 1967. V. 91. P. 288.
- ¹²⁰ Lo Dato V., Katsuura K.//J. Chem. Phys. 1969. V. 50. P. 2588.
- ¹²¹ Bottcher C. B., Docken K.//J. Phys. Ser. B. 1974. V. 7. P. 5.
- ¹²² Bottcher C. B.//Ibidem. P. L352.
- ¹²³ Hazi A. U.//Ibidem. 1975. V. 8. P. L262; Electron-Molecule and Photon-Molecule Collisions.—New York: Plenum, 1979.—P. 281; Electron-Atom and Electron-Molecule Collisions.—New York: Plenum, 1983.—P. 103.
- ¹²⁴ Guberman S.//J. Chem. Phys. 1983. V. 78. P. 1404.
- ¹²⁵ Hazi A. U., Derkits C., Bardsley J. N.//Phys. Rev. Ser. A. 1983. V. 27. P. 1751.
- ¹²⁶ Hara S., Sato H.//J. Phys. Ser. B. 1984. V. 17. P. 4301.
- ¹²⁷ Tennyson J., Noble C. J., Salvini S.//Ibidem. P. 905.
- ¹²⁸ Tennyson J., Noble C. J.//Ibidem. 1985. V. 18. P. 155.
- ¹²⁹ Sidis V.//Ibidem. 1973. V. 6. P. 1188.
- ¹³⁰ Hara S., Sato H.//Ibidem. 1978. V. 11. P. 955.
- ¹³¹ Hara S., Sato H.//Ibidem. 1980. V. 13. P. 4577.
- ¹³² Lopez V., Macias A., Piacentini R. D., Riera A. et al.//Ibidem. 1978. V. 11. P. 2889.
- ¹³³ Асатрян В. Р., Афросимов В. В., Гордеев Ю. С., Шергин А. П.//Письма ЖЭТФ. 1986. Т. 44. С. 454.
- ¹³⁴ Девдариани А. З., Островский В. Н., Себякин Ю. Н.//ЖЭТФ. 1977. Т. 73. С. 412.
- ¹³⁵ Кишиневский Л. М., Краков Б. Г., Парилис Э. С. Теория возмущений в атомных расчетах.— М., 1985.— С. 187.
- ¹³⁶ Miller W. H., Schaefer H. F.//J. Chem. Phys. 1970. V. 53. P. 1421.
- ¹³⁷ Miller W. H., Slocumb C. A., Schaefer H. F.//Ibidem. 1972. V. 56. P. 1347.
- ¹³⁸ Macias A., Mendizabal R., Pelayo F., Riera A. et al.//J. Mol. Struct. 1984. V. 107. P. 245; Phys. Rev. Ser. A. 1986. V. 33. P. 242.
- ¹³⁹ Kishinevsky L. M., Krakov B. G., Parilis E. S.//Phys. Lett. Ser. A. 1981. V. 85. P. 141.
- ¹⁴⁰ Кишиневский Л. М., Краков Б. Г., Парилис Э. С.//⁸⁸—С. 136.
- ¹⁴¹ Краков Б. Г. Теория оже-переходов в квазимолекуле с участием многозарядных ионов: Автореферат диссертации ... канд. физ.-мат. наук.— Ташкент, 1986.
- ¹⁴² Матвеев В. И., Парилис Э. С.//Письма ЖТФ. 1979. Т. 5. С. 297; ЖТФ. 1981. Т. 51. С. 1792.
- ¹⁴³ Афросимов В. В., Гордеев Ю. С., Зиновьев А. Н., Расулов Д. Х., Шергин А. П.//Письма ЖЭТФ. 1976. Т. 24. С. 33.
- ¹⁴⁴ Афросимов В. В., Месхи Г. Г., Царев Н. Н., Шергин А. П.//Ibidem. 1980. Т. 31. С. 729; 1983. Т. 84. С. 454.
- ¹⁴⁵ Mikoushkin V. M., Ogurtsov G. N., Flaks I. P.//J. Phys. Ser. B. 1983. V. 16. P. L405.
- ¹⁴⁶ Lam Kai-Shue, Bellum J., Thomas G.//J. Chem. Phys. 1978. V. 33. P. 219.
- ¹⁴⁷ Cohen J. S., Martin R. L., Lane N.//Phys. Rev. Ser. A. 1985. V. 31. P. 152.
- ¹⁴⁸ Кишиневский Л. М., Краков Б. Г., Парилис Э. С.//9-я Всесоюзная конференция по физике электронных и атомных столкновений.— Рига, 1984.— Т. 1. С. 40.
- ¹⁴⁹ Матвеев В. И., Парилис Э. С.//УФН. 1982. Т. 138. С. 537.
- ¹⁵⁰ Кишиневский Л. М., Матвеев В. И., Парилис Э. С.//Письма ЖТФ. 1976. Т. 2. С. 710.
- ¹⁵¹ Краков Б. Г., Парилис Э. С.//Ibidem. 1985. Т. 11. С. 1221.
- ¹⁵² Афросимов В. В., Гордеев Ю. С. и др.//Письма ЖЭТФ. 1975. Т. 21. С. 535.
- ¹⁵³ Mockler P. H., Folkmann F.//Structure and Collisions of Ions and Atoms.— Heidelberg, FRG, 1977.—P. 347.
- ¹⁵⁴ Николс Р., Стюарт А. Атомные и молекулярные процессы.— М.: Мир, 1964.—С. 48.
- ¹⁵⁵ Briggs J. S.//J. Phys. Ser. B. 1974. V. 7. P. 47.
- ¹⁵⁶ Кишиневский Л. М., Краков Б. Г., Парилис Э. С.//Опт. и спектр. 1984. Т. 57. С. 1003.

- ¹⁵⁷ Зельдович Я. Б., Попов В. С.//УФН. 1971. Т. 105. С. 403.
- ¹⁵⁸ Герштейн С. С., Зельдович Я. Б.//ЖЭТФ. 1969. Т. 57. С. 654; Lett. Nuovo-Cimento. 1969. V. 1. P. 835.
- ¹⁵⁹ Попов В. С.//ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 35.
- ¹⁶⁰ Попов В. С., Рожденственская Т. И.//Письма ЖЭТФ. 1971. Т. 14. С. 267.
- ¹⁶¹ Попов В. С.//Ibidem. 1972. Т. 16. С. 355; ЯФ. 1973. Т. 17. С. 621; 1974. Т. 19. С. 155.
- ¹⁶² Маринов М. С., Попов В. С.//ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 2141; 1975. Т. 68. С. 421; ЯФ. 1976. Т. 23. С. 479.
- ¹⁶³ Переломов А. М., Попов В. С.//ТМФ. 1973. Т. 14. С. 18.
- ¹⁶⁴ Маринов М. С., Попов В. С., Столин В. Л.//Письма ЖЭТФ. 1974. Т. 19. С. 76.
- ¹⁶⁵ Müller B., Rafelski J., Greiner W.//Phys. Lett. Ser. B. 1973. V. 47. P. 5.
- ¹⁶⁶ Müller B., Greiner W.//Zs. Naturforschung. 1976. Bd 31a. S. 1.
- ¹⁶⁷ Smith K., Peitz H., Müller B., Greiner W.//Phys. Rev. Lett. 1974. V. 32. P. 554.
- ¹⁶⁸ Smith K., Müller B., Greiner W.//J. Phys. Ser. B. 1975. V. 8. P. 75.
- ¹⁶⁹ Oberacker V., Soff G., Greiner W.//Phys. Rev. Lett. 1976. V. 36. P. 1024.
- ¹⁷⁰ Tomoda T., Weidenmüller H. A.//Phys. Rev. Ser. A. 1982. V. 26. P. 162.
- ¹⁷¹ Tomoda T.//Ibidem. P. 174.
- ¹⁷² Soff G., Greiner W.//J. Phys. Ser. B. 1982. V. 15. P. 681.
- ¹⁷³ Anholt R., Jakubassa-Amundsen D. H., Amundsen P. A., Aashamar K.//Phys. Rev. Ser. A. 1983. V. 27. P. 680.
- ¹⁷⁴ Valluri S. R., Becker U., Grün N., Scheid W.//J. Phys. Ser. B. 1984. V. 17. P. 4359.
- ¹⁷⁵ Soff G., Reinhardt J., Müller B., Greiner W.//Phys. Rev. Lett. 1977. V. 38. P. 592.
- ¹⁷⁶ Bokenmeyer H. et al. Quantum Electrodynamics of Strong Fields.— New York: Plenum, 1981.— P. 173.
- ¹⁷⁷ Müller B., Rafelski J., Greiner W.//Zs. Phys. 1972. Bd 257. S. 183.
- ¹⁷⁸ Peitz H., Müller B., Rafelski J., Greiner W.//Nuovo Gimento Lett. 1973. V. 8. P. 37.
- ¹⁷⁹ Lichten W., Robatino A.//Phys. Rev. Lett. 1985. V. 54. P. 781.
- ¹⁸⁰ Balantekin A. B., Bottcher C., Strayer M. R., Lee S.//Ibidem. V. 55. P. 461.
- ¹⁸¹ Rafelski J., Fulcher J. P., Klein A.//Phys. Rep. 1978. V. 38. P. 229.
- ¹⁸² Reinhardt J., Greiner W.//Rep. Prog. Phys. 1977. V. 40. P. 219.
- ¹⁸³ Винницкий С. И., Пономарев Л. И., Пузынин И. В., Пузынина Т. П. и др.//ЖЭТФ. 1978. Т. 74. С. 849.
- ¹⁸⁴ Быстрицкий В. М., Желепов В. П., Ершова З. В., Зинов В. Г. и др.//Ibidem. 1981. Т. 80. С. 1700.
- ¹⁸⁵ Grassi L., Fiorentini G.//Phys. Rep. 1982. V. 86. P. 169.
- ¹⁸⁶ Leon M., Bethe H. A.//Phys. Rev. 1962. V. 127. P. 636.
- ¹⁸⁷ Маркушин В. Е.//ЖЭТФ. 1981. Т. 80. С. 35.
- ¹⁸⁸ Герштейн С. С., Петрухин В. И., Пономарев Л. И., Прокошкин Ю. Д.//УФН. 1969. Т. 97. С. 3.
- ¹⁸⁹ Краков Б. Г., Парилис Э. С.//⁸⁸—С. 134.
- ¹⁹⁰ Демков Ю. Н., Зарецкий Д. Ф., Карпешин Ф. Ф., Листенгартен М. А. и др.//Письма ЖЭТФ. 1978. Т. 28. С. 287.
- ¹⁹¹ Волков Н. Г., Емельянов В. М., Крайнов В. П.//ЯФ. 1979. Т. 29. С. 1171.
- ¹⁹² Емельянов В. М., Крайнов В. П.//ЯФ. 1980. Т. 31. С. 899.
- ¹⁹³ Bohr N.//Phys. Rev. 1940. V. 58. P. 654.
- ¹⁹⁴ Девдариани А. З., Загребин А. Д.//ЖЭТФ. 1984. Т. 87. С. 14.
- ¹⁹⁵ Lassen N.O.//Mat. Phys. Medd. 1951. V. 26. P. 5.
- ¹⁹⁶ Бромли Д.//УФН. 1980. Т. 131. С. 695.
- ¹⁹⁷ Cseh J.//J. Phys. Ser. G. 1983. V. 9. P. 655.
- ¹⁹⁸ Saris F. W.//Atomkernenergie. 1974. Bd 24. S. 73.
- ¹⁹⁹ Никулин В. К. Физика электронных и атомных столкновений.— Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1980.—С. 27.
- ²⁰⁰ Mokler P. H., Liesen D.//GSI. 1981.
- ²⁰¹ Mokler P. H., Stein H. J., Armbruster P.//Phys. Rev. Lett. 1972. V. 29. P. 827.
- ²⁰² Meyerhof W. E., Saylor T. K., Lazarus S. M., Little A. et al.//Phys. Rev. Lett. 1973. V. 30. P. 1279.

- ²⁰³ Macek J. H., Briggs J. S.//J. Phys. Ser. B. 1974. V. 7. P. 1312, 1506.
- ²⁰⁴ Meyerhof W. E., Saylor T. K., Lazarus S. M., Little A. et al.//Phys. Rev. Lett. 1975. V. 32. P. 1279.
- ²⁰⁵ Thorson W. R., Choi J. H.//Phys. Rev. Ser. A. 1977. V. 15. P. 550.
- ²⁰⁶ Saris F. W., de Heer F. J.//Atomic Physics.— New York: Plenum, 1975.— V. 4. P. 287.
- ²⁰⁷ Pepper G. H., Brown L.//Phys. Rev. Ser. A. 1976. V. 14. P. 2010.
- ²⁰⁸ Morovic T., Fricke B., Rosen A., Ellis D. E.//Phys. Lett. Ser. A. 1976. V. 59. P. 375.
- ²⁰⁹ Sepp W.-D., Fricke B., Morovic T.//Ibidem. 1981. V. 81. P. 258.
- ²¹⁰ Fritsch W., Wille U.//J. Phys. Ser. B. 1979. V. 12. P. L335.
- ²¹¹ Anholt R.//Zs. Phys. Kl. A. 1979. Bd 292. S. 123.
- ²¹² Meyerhof W. E., Clark D. L., Stoller Ch., Morenzoni E.//Phys. Lett. Ser. A. 1979. V. 70. P. 303.
- ²¹³ Stoller Ch., Morenzoni E., Wölflli W., Meyerhof W. E.//Zs. Phys. Kl. A. 1980. Bd 297. S. 93.
- ²¹⁴ Kirsch J., Betz W., Reinhardt J., Soff et al.//Phys. Lett. Ser. B. 1978. V. 72. P. 298.
- ²¹⁵ Morovic T., Fricke B., Rosen A., Ellis D. E.//Intern. J. Quant. Chem. Symp. 1976. No 10. P. 227.
- ²¹⁶ Hartung H., Fricke B., Morovic T., Sepp W.-D. et al.//J. Phys. Ser. B. 1979. V. 12. P. 2193.
- ²¹⁷ Mokler P. H., Hagmann S., Armbruster P., Kraft G. et al.//Atomic Physics.— New York: Plenum, 1975.—V. 4. P. 301.
- ²¹⁸ Greenberg J. S., Davis C. K., Vincent P.//Phys. Rev. Lett. 1974. V. 33. P. 473.
- ²¹⁹ Kraft G., Mokler P. H., Stein H. J.//Ibidem. P. 476.
- ²²⁰ Kraft G., Stein H.-J., Mokler P. H., Hagmann S.//Verhandl. DPG. 1974. Bd 9. S. 77.
- ²²¹ Folkmann F., Armbruster P., Hagmann S., Kraft G. et al.//Zs. Phys. Kl. A. 1976. Bd 276. S. 15.
- ²²² Stoller C., Wölflli W., Bonani G., Stöckli M. et al.//J. Phys. Ser. B. 1977. V. 10. P. L347.
- ²²³ Müller B., Kent-Smith R., Greiner W.//Phys. Lett. Ser. B. 1974. V. 49. P. 219.
- ²²⁴ Müller B., Greiner W.//Phys. Rev. Lett. 1974. V. 33. P. 469.
- ²²⁵ Kent-Smith R., Müller B., Greiner W.//J. Phys. Ser. B. 1975. V. 8. P. 75.
- ²²⁶ Briggs J. S., Dettmann R.//Ibidem. 1977. V. 10. P. 1113.
- ²²⁷ Anholt R.//Zs. Phys. Kl. A. 1978. Bd 288. S. 257; 1979. Bd 291. S. 289.
- ²²⁸ Hartung H., Fricke B.//Ibidem. 1978. Bd 288. S. 345; Phys. Lett. Ser. A. 1979. V. 71. P. 335.
- ²²⁹ Briggs J. S., Macek J. H., Taulbjerg K.//J. Phys. Ser. B. 1979. V. 12. P. 1457.
- ³⁰ Gros M., Müller B., Greiner W.//Ibidem. 1976. V. 9. P. 1849.
- ²³¹ Gros M., Greenland P. T., Greiner W.//Zs. Phys. Kl. A. 1977. Bd 280. S. 31.
- ²³² Müller B.//Proc. of the 9th Intern. Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions.— Seattle, USA, 1975.— P. 481.
- ²³³ Vincent P., Greenberg J. S.//J. Phys. Ser. B. 1979. V. 12. P. L641.
- ²³⁴ Nikulin V. K.//Proc. of the 11th Intern. Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions.— Kyoto, Japan, 1979.— P. 730.
- ²³⁵ Демков Ю. Н., Овчинников С. Ю.//Письма ЖЭТФ. 1987. Т. 46. С. 14.