# СТОЛКНОВЕНИЕ РИДБЕРГОВСКОГО АТОМА А\*\* С АТОМОМ В, НАХОДЯЩИМСЯ В ОСНОВНОМ ЭЛЕКТРОННОМ СОСТОЯНИИ. ОПТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ

Г. В. Голубков<sup>а</sup><sup>\*</sup>, А. З. Девдариани<sup>b</sup>, М. Г. Голубков<sup>а</sup>

<sup>а</sup> Институт химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук 117977, Москва, Россия

> <sup>b</sup> Научно-исследовательский институт физики им. В. А. Фока Санкт-Петербургского государственного университета 198904, Санкт-Петербург, Россия

> > Поступила в редакцию 28 февраля 2002 г.

Предложен метод расчета комплексного оптического потенциала взаимодействия медленно сталкивающихся ридберговского атома A<sup>\*\*</sup> с нейтральным атомом B, находящимся в основном электронном состоянии. В основе метода лежит асимптотический подход с привлечением теории многоканального квантового дефекта, использующей формализм перенормированных уравнений Липпмана–Швингера. Потенциал вводится как матричный элемент  $\langle q | \mathbf{V}_{opt} | q \rangle$  оператора оптического взаимодействия, для которого выведено интегральное уравнение. Он рассчитывается на базисе волновых функций  $| q \rangle$  для свободных частиц. Получены достаточно простые выражения для сдвига и уширения ионного терма и проанализированы их основные особенности. В качестве иллюстрации рассчитан оптический потенциал системы Na<sup>\*\*</sup> (nl) + B, где B — атомы инертных газов.

PACS: 31.50.Df

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы с участием высоковозбужденных (ридберговских) атомов и молекул широко распространены в различных астрофизических и плазменных явлениях и интенсивно исследуются экспериментально и теоретически. К настоящему времени в литературе накоплен обширный фактический материал, который содержится в многочисленных оригинальных статьях и обзорах, а также изложен в монографиях [1-4]. Тем не менее имеется ряд процессов, которые до сих пор остаются малоизученными. К ним, например, относится диффузия ридберговских атомов в атмосфере инородного буферного газа. Если один из атомов сильно возбужден, то наиболее эффективным является использование «трехчастичной» модели, когда оптический электрон находится на орбите, размеры которой существенно превышают характерные размеры ионного остова и атомов среды. Тогда при описании «упругого» рассеяния

ридберговских атомов на атомах мишени помимо определения потенциальной энергии их взаимодействия необходимо также учитывать и неупругие виртуальные переходы во все возможные дискретные и континуальные состояния слабосвязанного электрона. Естественным подходом к решению этой задачи является введение оптического потенциала, мнимая часть которого характеризует полную вероятность переходов в указанные состояния.

Переход от многочастичного к двухчастичному описанию упругого столкновения атомных частиц в представлении оптического потенциала является одним из традиционных методов в квантовой теории рассеяния. Обычно в теорию вводится нелокальный оператор  $\mathbf{V}_{opt}$  и строится многочастичное уравнение для его определения. Такая постановка задачи носит формальный характер и не может быть разрешена без дополнительных предположений о взаимодействующей системе [5]. Для решения задачи необходимо перейти к представлению невзаимодействующих сталкивающихся частиц, определить базис его

<sup>\*</sup>E-mail: golubkov@center.chph.ras.ru

собственных состояний  $|q\rangle$  и вычислить соответствующий матричный элемент  $\langle q | \mathbf{V}_{opt} | q \rangle$ . Этот матричный элемент и будет представлять собой искомый оптический потенциал  $V_{opt}$ , мнимая часть которого должна включать полный набор квантовых чисел s, описывающих внутренние состояния взаимодействующей системы, а также зависеть от полной энергии E и орбитального момента сталкивающихся частиц. Последние являются интегралами движения и должны сохраняться.

Концепция оптического потенциала неоднократно применялась в теории атомных столкновений. В частности, она широко использовалась при описании процессов типа пеннинговской ионизации [6]. В настоящей работе рассматривается медленное упругое столкновение ридберговского атома  $A^{**}(n \gg 1)$ с атомом В в основном электронном состоянии (п главное квантовое число ридберговского уровня) и определяется оптический потенциал для этой системы. Здесь следует выделить две принципиально различные физические ситуации: E < 0 и E > 0. В первой оптический потенциал формируется за счет виртуальных переходов между связанными состояниями электрона в дискретном спектре, а во второй возникает дополнительная возможность ионизации атома А\*\*.

Поскольку при взаимодействии с возмущающим атомом В слабосвязанный электрон ведет себя как свободная частица, оптический потенциал удается построить достаточно строго и просто. Задача решается в рамках асимптотической теории с использованием интегрального варианта метода многоканального квантового дефекта [7]. В качестве иллюстрации рассчитаны потенциалы взаимодействия высоковозбужденного атома Na<sup>\*\*</sup>(nl) с атомами инертных газов.

### 2. ОБЩИЕ УРАВНЕНИЯ ТЕОРИИ

Рассмотрим медленное упругое столкновение высоковозбужденного (ридберговского) атома  $A^{**}(nl)$ с невозбужденным атомом В. Полная энергия системы E равна ( $\hbar = e = m_e = 1$ )

$$E = -\frac{1}{2\nu_l^2} + E_k,$$
(1)

где  $\nu_l = n - \mu_l - эффективное главное квантовое число, <math>\mu_l$  — квантовый дефект уровня, l — угловой момент электрона,  $E_k$  — начальная относительная энергия сталкивающихся частиц. Будем считать потенциал взаимодействия  $U_{A+B}$  иона  $A^+$  с атомом В

известным. Для решения задачи на собственные значения воспользуемся интегральным уравнением для  $\tau$ -оператора сдвига уровней, которое в этом случае принимает вид [7]

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{U}_{\mathbf{A}^+\mathbf{B}}\mathbf{G}(E)\boldsymbol{\tau}.$$
 (2)

Трехчастичный оператор взаимодействия  $U_{A+B}$ , который описывает взаимодействующую пару  $(A^+ - B)$  плюс свободный электрон  $e^-$ , является локальным и представляется как

$$\mathbf{U}_{\mathrm{A}^{+}\mathrm{B}}(\mathbf{R},\mathbf{R}';\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}') = \\ = (2\pi)^{6} U_{\mathrm{A}^{+}\mathrm{B}}(R) \sum_{q} |q(\mathbf{R},\boldsymbol{\rho})\rangle \langle q(\mathbf{R}',\boldsymbol{\rho}')|, \quad (3)$$

где R и  $\rho$  — координаты иона A<sup>+</sup> и электрона, отсчитанные от центра атома В. Базисная волновая функция  $|q\rangle$  выглядит следующим образом

$$|q(\mathbf{R},\boldsymbol{\rho})\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \exp\left[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}+\mathbf{p}_e\cdot\boldsymbol{\rho})\right].$$
 (4)

Здесь  $k = \sqrt{2M_c E_k}$  — относительный импульс сталкивающихся частиц A<sup>+</sup> и B,  $M_c$  — их приведенная масса,  $p_e$  — импульс электрона. Волновая функция (4), описывающая свободное движение частиц, по существу, отвечает первому порядку борновского приближения. Поскольку в дальнейшем нас будет интересовать область достаточно больших ( $R_{min} \leq R$ ) межатомных расстояний (для которых потенциал взаимодействия  $U_{A^+B}$  является поляризационным), условие малости соответствующей поправки к волновой функции [8]

$$M_c \left| \int_{R_{min}}^{\infty} U_{\mathbf{A}^+ \mathbf{B}}(r) \left[ \exp(2i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) - 1 \right] dr \right| \ll k$$

для случая медленного столкновения частиц  $(kR_{min} < 1)$  приводит к требованию выполнения следующих неравенств

$$k\sqrt{M_c\beta} \ll 1, \quad n > (M_c\beta/8)^{1/4}.$$
 (5)

В приведенных выше выражениях  $\beta$  — поляризуемость атома В,  $R_{min}$  — некоторое минимальное расстояние между частицами А<sup>+</sup> и В, которое мы определим ниже (см. разд. 3). Тогда для оператора взаимодействия U<sub>A+B</sub> с учетом (4) получим следующее выражение:

$$\mathbf{U}_{\mathrm{A}^{+}\mathrm{B}}(\mathbf{R},\mathbf{R}';\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}') = \\ = (2\pi)^{6} U_{\mathrm{A}^{+}\mathrm{B}}(R) \delta(\mathbf{R}-\mathbf{R}') \delta(\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}'). \quad (6)$$

При этом нетрудно убедиться, что матричный элемент

$$\langle q | \mathbf{U}_{\mathrm{A}^+\mathrm{B}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}') | q \rangle = U_{\mathrm{A}^+\mathrm{B}}(R).$$

Гриновский оператор G(E) в (2) описывает систему  $A^{**} + B$  с выключенным  $U_{A+B}$  взаимодействием, т. е. атом B в уравнении (2) считается взаимодействующим только со слабосвязанным электроном. Для регулярного построения этого оператора воспользуемся уравнением Дайсона

$$\mathbf{G}(E) = \mathbf{G}_{\mathrm{A}^{**}\mathrm{B}}(E) + \mathbf{G}_{\mathrm{A}^{**}\mathrm{B}}(E)\mathbf{V}_{e^{-}\mathrm{B}}\mathbf{G}(E), \quad (7)$$

в котором  $\mathbf{V}_{e^-B}$  представляет собой оператор  $e^-$ -B-взаимодействия, а гриновский оператор  $\mathbf{G}_{A^{**}B}$  описывает невзаимодействующую систему  $A^{**}$  + B с заданной кинетической энергией  $E_k$ .

Зависящий от полной энергии системы *E* нелокальный оператор оптического взаимодействия вводится в теорию следующим образом:

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{V}_{opt}(E)\mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}\mathbf{B}}(E)\boldsymbol{\tau}.$$

Он удовлетворяет интегральному уравнению

$$\mathbf{V}_{opt} = \mathbf{U}_{\mathbf{A}^+\mathbf{B}} + \mathbf{U}_{\mathbf{A}^+\mathbf{B}}\mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}\mathbf{B}}\mathbf{V}_{e^-\mathbf{B}}\mathbf{G}\mathbf{V}_{opt}.$$

Воспользовавшись известным соотношением в теории рассеяния

$$\mathbf{V}_{e^{-}B}\mathbf{G} = \mathbf{T}_{e^{-}B}\mathbf{G}_{A^{**}B},$$

решение уравнения (7) можно формально представить в виде

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}\mathbf{B}} + \mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}\mathbf{B}}\mathbf{T}_{e^{-}\mathbf{B}}\mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}\mathbf{B}}$$
(8)

 $(\mathbf{T}_{e^-B}$  — оператор столкновений слабосвязанного электрона с атомом B) и переписать интегральное уравнение для оператора  $\mathbf{V}_{opt}$  как

$$\mathbf{V}_{opt} = \mathbf{U}_{A^+B} + \mathbf{U}_{A^+B} \mathbf{G}_{A^{**}B} \mathbf{T}_{e^-B} \mathbf{G}_{A^{**}B} \mathbf{V}_{opt}.$$
 (9)

Это представление является точным и допускает дальнейшие преобразования. Например, здесь удобно перейти к вещественной  $\mathbf{K}_{e^-B}$ -матрице рассеяния (строящейся, как известно, на стоячих волнах), используя уравнение Гайтлера [9]:

$$\mathbf{T}_{e^{-}B} = \mathbf{K}_{e^{-}B} - i\mathbf{K}_{e^{-}B}\mathbf{T}_{e^{-}B}.$$
 (10)

В результате операторное уравнение (9) принимает окончательный вид:

$$\mathbf{V}_{opt} = \mathbf{U}_{A+B} + \mathbf{U}_{A+B} \mathbf{G}_{A**B} \times \\ \times \left[ (\mathbf{1} + i \mathbf{K}_{e-B})^{-1} \mathbf{K}_{e-B} \right] \mathbf{G}_{A**B} \mathbf{V}_{opt}.$$
(11)

Из структуры уравнения (11) становится очевидной физическая причина появления мнимости в операторе оптического взаимодействия. Действительно, она возникает за счет взаимодействия электрона с возмущающим атомом В, приводящего к виртуальным переходам, сопровождающимся изменением его импульса и углового момента. Дополнительные мнимости, содержащиеся при E > 0 в функции Грина  $G_{A^{**}B}$ , должны оказывать влияние только на величину сдвига и уширения потенциала  $U_{A+B}$ .

# 3. ФУНКЦИЯ ГРИНА невзаимодействующей системы $A^{**} + B$

По определению оператор  $G_{\mathrm{A}^{**}\mathrm{B}}$  представляет собой свертку

$$\mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}\mathbf{B}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; E) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}} \times \left(E - \frac{k^2}{2M_c}\right) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}') d\mathbf{k}, \quad (12)$$

где  $\mathbf{G}_{A**}$  — гриновский оператор изолированного ридберговского атома. Нетрудно показать, что интеграл (12) сводится к интегралу вида

$$\mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}\mathbf{B}}(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; E) = \frac{1}{(2\pi)^2} \times \\ \times \int_{0}^{k_{max}} \mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}}(E - E_k) \frac{\sin[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R} - \mathbf{R}')]}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|} k \, dk, \qquad (13)$$
$$E_k = k^2/2M_c.$$

Заметим, что в случае E < 0 это выражение является строго вещественным, так как в соответствии с (1) функция Грина ридберговского атома  $G_{A^{**}}$  здесь определена при отрицательной энергии и отвечает связанному состоянию электрона во всей области изменения координат электрона и атома В. Для положительной полной энергии системы (E > 0) функция G<sub>A\*\*</sub> в (13) является, вообще говоря, комплексной, поскольку при  $E_k < E$  она описывает движение электрона в сплошном спектре. Эта область изменения импульса k сталкивающихся частиц включает виртуальные переходы в ионизационный континуум и переходы между его состояниями. Поскольку основной вклад в (13) вносит классически разрешенная область движения, максимальное значение импульса выбирается из условия

$$0 \le E + \frac{1}{R} - \frac{k^2}{2M_c}$$

и равно

$$k_{max} = \sqrt{2M_c \left(E + \frac{1}{R}\right)}, \qquad (14)$$
$$R_{min} = I_{\rm A}^{-1}, \quad R_{min} \le R \le 2\nu_l^2$$

(*I*<sub>A</sub> — потенциал ионизации атома A). Строго говоря, максимальное значение кинетической энергии (при заданном *R*) определяется выражением

$$E_k^{(max)}(R) = \frac{1}{2\nu_{min}^2(R)}$$

что соответствует предельному значению виртуального импульса

$$k_{max} = \sqrt{M_c} \, / \nu_{min}(R)$$

(движение электрона здесь не является классическим). Поскольку интеграл (13) набирается в области  $kR \leq 1$ , можно положить

$$E_k^{(max)}(R) = 1/R$$

и получить (14).

Перейдем теперь к определению функции Грина  $\mathbf{G}_{A^{**}}$  высоковозбужденного атома. Уравнение для оператора  $\mathbf{G}_{A^{**}}$  по аналогии с (8) имеет вид

$$\mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}}(E) = \mathbf{G}^{(c)}(E) + \mathbf{G}^{(c)}(E)\tilde{\mathbf{T}}(E)\mathbf{G}^{(c)}(E), \quad (15)$$

где  $\mathbf{G}^{(c)}$  — кулоновская функция Грина,  $\tilde{\mathbf{T}}$  — матрица столкновений электрона с ионом  $\mathbf{A}^+$ . Важно подчеркнуть, что полюса кулоновской функции Грина здесь строго компенсируются и спектр собственных значений энергии определяется полюсами  $\tilde{\mathbf{T}}$ -матрицы, которая удовлетворяет интегральному уравнению [10]

$$\tilde{\mathbf{T}} = \mathbf{t} + \mathbf{t} \sum_{l} |lm\rangle \langle lm| \operatorname{ctg}(\pi\nu(\varepsilon)) \tilde{\mathbf{T}}, \qquad (16)$$

где матрица реакций **t** описывает взаимодействие электрона с ионным остовом. Ее диагональные элементы связаны с квантовым дефектом  $\mu_l$  высоковозбужденного атома соотношением  $t_{ll} = -\operatorname{tg}(\pi \mu_l)$ . В одноканальном случае, который нас в дальнейшем будет интересовать, диагональные элементы  $\tilde{\mathbf{T}}$ -оператора равны

$$\tilde{T}_{ll}(\varepsilon) = -\frac{\operatorname{tg}\left(\pi\nu(\varepsilon)\right)\operatorname{tg}(\pi\mu_l)}{\operatorname{tg}\left(\pi\nu(\varepsilon)\right) + \operatorname{tg}(\pi\mu_l)}.$$
(17)

Наибольший интерес для нас представляет асимптотическая область координат слабосвязанного электрона, расположенная вблизи возмущающего атома В (т.е. при  $\rho, \rho' \ll R$ ), где имеет место следующее общее представление [7]

$$\mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}', \mathbf{R}, \varepsilon) = \mathbf{G}_{0}^{(c)}(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}', \varepsilon) + 2\sum_{s,s'} |s\rangle \langle s'| g_{ss'}(\mathbf{R}, \varepsilon), \quad (18)$$

$$g_{ss'}(\mathbf{R},\varepsilon) = \left[ p_e(\varepsilon) \operatorname{ctg} \left( \pi \nu(\varepsilon) \right) \delta_{ss'} + \alpha_{LL'}^{ll'}(\mathbf{R},\varepsilon) \delta_{M0} \delta_{M'0} \right].$$
(19)

Здесь

$$p_e(\varepsilon) = \left[2(\varepsilon + 1/R)\right]^{1/2}$$

 — квазиклассический импульс электрона в поле кулоновского центра,

$$\nu(\varepsilon) = (-2\varepsilon)^{-1/2}$$

— эффективное главное квантовое число,  $|s\rangle$  — электронная волновая функция

$$|s\rangle = |lmLM\rangle = j_L(p_e\rho)Y_{lm}(\mathbf{R}/R)Y_{LM}(\theta,\varphi), \quad (20)$$

 $j_L(x)$  — сферическая функция Бесселя первого рода порядка  $L, Y_{LM}(\theta, \varphi)$  — шаровая функция [8],  $\theta$  угол между направлениями векторов  $\mathbf{p}_e(\varepsilon)$  и  $\rho, L$  и M — орбитальный момент электрона относительно атома В и его проекция на направление вектора  $\mathbf{R}$ ,  $\mathbf{G}_0^{(c)}$  — гладкая часть кулоновской функции Грина:

$$\mathbf{G}_{0}^{(c)}(\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}';\varepsilon) = -\frac{\cos\left(p_{e}|\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}'|\right)}{2\pi|\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{\rho}'|}.$$
 (21)

Матрица $\alpha_{LL'}^{ll'}({\bf R},\varepsilon)$ в выражении (19) определяется как

$$\alpha_{LL'}^{ll'}(\mathbf{R},\varepsilon) = 2\pi^2 \sqrt{(2L+1)(2L'+1)} \times \frac{(-1)^{l+l'} (\nu(\varepsilon))^3}{\sin^2 (\pi\nu(\varepsilon))} \tilde{T}_{ll'}(\varepsilon) \times \tilde{\varphi}_{L\varepsilon}^{(l)}(R) \tilde{\varphi}_{L'\varepsilon}^{(l')}(R) |Y_{lm}(\mathbf{R}/R)|^2 \delta_{ll'}.$$
 (22)

Соответствующие радиальные волновые функции в выражении (22) имеют вид

$$\tilde{\varphi}_{L\varepsilon}^{(l)}(R) = \begin{cases} Q_{l\varepsilon}(R,\nu), & L = 2k, \\ Q_{l\varepsilon}(R,\nu-1/2), & L = 2k+1, \end{cases}$$
$$k = 0, 1, 2, \dots$$

Они различаются сдвигом фазы на  $\pi/2$  и выражаются через функции Уиттекера

$$Q_{l\varepsilon}(r,\nu) = \frac{W_{\nu,l+1/2}(2r/\nu)}{r\nu\sqrt{\Gamma(\nu-l)\Gamma(\nu+l+1)}},$$
 (23)

 $\Gamma(x)$  — гамма-функция. При больших значениях  $r \gg 1$  их асимптотические разложения выглядят как [11]

$$\tilde{\varphi}_{L\varepsilon}(r) = -\frac{2}{r} i^{L+1} \left[ 2\pi p_e(\varepsilon) \nu^3(\varepsilon) \right]^{-1/2} \times \\ \times \begin{cases} \cos\left[\sqrt{8r} - \pi\nu - \pi/4\right], & L = 2k+1, \\ i\sin\left[\sqrt{8r} - \pi\nu - \pi/4\right], & L = 2k. \end{cases}$$
(24)

Для нахождения явного вида оптического потенциала требуется разложить (16) и (18) по сферическим гармоникам [12], т. е.

$$\mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}\mathbf{B}}(E) = \frac{2}{\pi} \sum_{\bar{L}\bar{M}} Y_{\bar{L}\bar{M}}(\mathbf{R}/R) Y_{\bar{L}\bar{M}}^{*}(\mathbf{R}'/R') \times \\ \times \int_{0}^{k_{max}} j_{\bar{L}}(kR) j_{\bar{L}}(kR') \mathbf{G}_{\mathbf{A}^{**}}(E-E_{k}) k^{2} dk, \quad (25)$$

$$\frac{\cos(p_e|\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'|)}{2\pi|\boldsymbol{\rho} - \boldsymbol{\rho}'|} = 2p_e \sum_{LM} n_L(p_e\rho) j_L(p_e\rho') \times \\ \times Y_{LM}(\boldsymbol{\rho}/\rho) Y_{LM}^*(\boldsymbol{\rho}'/\rho'), \quad \rho > \rho', \quad (26)$$

где  $\tilde{L}$  и  $\tilde{M}$  — момент и его проекция на направление вектора  $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$ ,  $n_L(p_e \rho)$  — сферическая функция Бесселя второго рода порядка L, связанная с функцией Неймана соотношением [8]

$$n_L(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} N_{L+1/2}(x)$$

## 4. ОПТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ

Обратимся теперь к нахождению явного вида оптического потенциала. С этой целью воспользуемся первым порядком теории возмущений и заменим оператор  $\mathbf{V}_{opt}$  в правой части уравнения (11) на локальный оператор (5). Это означает, что в рассматриваемой области изменения R поправки к потенциалу  $U_{A+B}$  должны быть малы. Тогда оптический потенциал будет определяться как матричный элемент

$$V_{opt} = \langle q | \mathbf{V}_{opt} | q \rangle, \qquad (27)$$

рассчитанный с базисными волновыми функциями (4). Причем гриновский оператор  $\mathbf{G}_{A^{**B}}$  в (27) будет описывать движение частиц с заданными орбитальными моментами  $\tilde{L}$ , L и l. Последнее означает, что в выражениях (16) и (25) следует опустить суммирование по указанным индексам. Вследствие ортогональности сферических функций Бесселя первого и второго родов, а также того обстоятельства, что на больших расстояниях функция  $n_L(x)$  сводится к  $j_{L+1}(x)$ , первое слагаемое в (16) не вносит вклада и его следует опустить. Интегрируя по межатомным координатам и пользуясь свойством симметрии оператора

$$\langle s | \mathbf{K}_{e^- \mathbf{B}} | s' \rangle = (\mathbf{K}_{e^- \mathbf{B}})_{ss} \delta_{ss'},$$

получим

$$V_{opt}\left(E, n, l, \tilde{L}, R\right) = \\ = U_{A+B}(R) + 2^{14} \pi^4 U_{A+B}^2(R) |Y_{\tilde{L}0}(\theta = 0)|^4 \times \\ \times \left\{ \int_{0}^{k_{max}} k^2 dk \, k'^2 dk' j_L^2(kR) j_L^2(k'R) \left[ \frac{(\mathbf{K}_{e-B})_{LL}}{1 + i(\mathbf{K}_{e-B})_{LL}} \right] \times \\ \times \sum_{mM} g_{ss}(R, \varepsilon_k) g_{ss}^*(R, \varepsilon_{k'}) \times \\ \times |Y_{lm}(\mathbf{R}/R)|^2 |Y_{LM}(\rho/\rho)|^2 \right\}, \quad (28)$$

где  $\varepsilon_k = E - k^2/2M_c$ ,  $\tilde{L}$  — начальный орбитальный момент сталкивающихся частиц A<sup>\*\*</sup> и В. Шаровую функцию  $Y_{lm}(\mathbf{R}/R)$  в (28), которая входит также в матрицу  $g_{ss'}(R,\varepsilon)$ , следует заменить на величину  $Y_{lm}(0)$ . Это связано с тем, что при  $l \ll \nu_l^{3/2}$  движение электрона вблизи атома В описывается плоской волной с импульсом, направленным вдоль вектора **R**.

Поскольку вблизи атома В ридберговский электрон ведет себя как свободная частица [13], диагональные элементы  $\mathbf{K}_{e^-B}$ -матрицы в (28), зависящие от полной энергии системы E и кинетических энергий падающего ( $\varepsilon_e$ ) и рассеянного ( $\varepsilon'_e$ ) электронов, можно заменить на соответствующие элементы  $\mathbf{K}_{e^-B}^{(0)}$ -матрицы рассеяния свободного электрона, взятые при

$$\varepsilon_e = E + 1/R - k^2/2M_c.$$

Это выполняется, если длина волны электрона  $\lambda$  мало меняется на размерах эффективной области его взаимодействия  $\rho_0$  с атомом В, т. е. при условии [4]

$$ho_0 rac{d\lambda}{dr} \ll \lambda$$
 или  $rac{
ho_0}{(p_e R)^2} \ll 1.$ 

Кроме того, необходимо, чтобы кинетическая энергия электрона  $\varepsilon_e$ была много больше его энергии связи, т. е.

$$n \gg \frac{1}{\sqrt{2(E+1/R)}}$$

В этом случае выражение (28), определенное для заданной начальной энергии  $E_k$ , принимает следующий вид:

$$V_{opt} = U_{A+B} + \Delta - i\frac{\Gamma}{2}, \qquad (29)$$

где сдвиг и уширение ионного терма равны

$$\Delta(E_k, n, l, \dot{L}, R) = = \frac{\pi K_{LL}^{(0)}(n, R)}{1 + \left[K_{LL}^{(0)}(n, R)\right]^2} S_{l\bar{L}}(E_k, R), \Gamma(E_k, n, l, \tilde{L}, R) = = \frac{2\pi [K_{LL}^{(0)}(n, R)]^2}{1 + \left[K_{LL}^{(0)}(n, R)\right]^2} S_{l\bar{L}}(E_k, R)$$
(30)

и зависят от начального возбуждения атома  $A^{**}(n,l)$ , орбитального момента  $\tilde{L}$  и расстояния R между частицами  $A^+$  и В. Выражение для фактора в (30) определяется знаком полной энергии системы E и записывается как

$$S_{l\bar{L}}(E_k, R) = \left[ 64\pi U_{A^+B}(R) Y_{L0}^2(\theta = 0) Y_{l0}(\theta = 0) \times \int_{0}^{k_{max}} j_{\bar{L}}^2(kR) g_{ss}(R, \varepsilon_k) k^2 dk \right]^2$$
(31)

для E < 0и

$$S_{l\bar{L}}(E_{k},R) = \left[64\pi U_{A^{+}B}(R)Y_{\bar{L}0}^{2}(\theta=0)Y_{l0}(\theta=0)\right]^{2} \times \\ \times \left| \int_{0}^{k_{max}} j_{\bar{L}}^{2}(kR)\operatorname{Re}g_{ss}(R,\varepsilon_{k})k^{2}dk + \right. \\ \left. + i \int_{0}^{\sqrt{2M_{c}E}} j_{\bar{L}}^{2}(kR)\operatorname{Im}g_{ss}(R,\varepsilon_{k})k^{2}dk \right|^{2}$$
(32)

для E > 0. Интегрирование в (31) фактически разбивается на две промежуточные области. В первой (при  $0 \le k \le \sqrt{2M_cE}$ ) действительные и мнимые части  $g_{ss}(R, \varepsilon_k)$  получаются заменой  $\nu = i/p$  в (17) и соответственно равны

$$\operatorname{Re} g_{ss}(R, \varepsilon_k) = -\frac{4\pi Y_{l0}^2(\theta = 0)}{R^2 p_e(\varepsilon_k)} \times \\ \times \sin(\pi\mu_l) \sin\left(4\sqrt{2R} + \pi\mu_l\right),$$

$$\operatorname{Im} g_{ss}(R, \varepsilon_k) = -p_e(\varepsilon_k) + \frac{4\pi Y_{l0}^2(\theta = 0)}{R^2 p_e(\varepsilon_k)} \times \\ \times \sin(\pi\mu_l) \cos\left(4\sqrt{2R} + \pi\mu_l\right).$$

$$(33)$$

Во второй области (при  $k > \sqrt{2M_cE}$ ) функция  $g_{ss}(E, \varepsilon_k)$  является действительной и определяется формулой (17).

Проанализируем теперь полученные результаты. Прежде всего заметим, что сдвиг потенциала  $\Delta$  пропорционален элементу  $K_{LL}^{(0)}$  и зависит от его знака, а ширина  $\Gamma \sim (K_{LL}^{(0)})^2$  всегда положительна. Величина  $S_{l\bar{L}}(E,n,R)$  является осциллирующей функцией расстояния R и полной энергии E. Для отрицательной энергии системы (E < 0) она обращается в нуль за пределами классически разрешенной области движения электрона (т.е. при  $R \ge (-E)^{-1}$ ). Кроме того, величина  $S_{l\bar{L}}(E,k,R)$  содержит центробежный фактор

$$\frac{\tilde{L}\left(\tilde{L}+1\right)}{2M_cR^2}$$

и должна возрастать с ростом углового момента сталкивающихся частиц $\tilde{L}.$ 

Осцилляции по R возникают за счет функций Бесселя  $j_{\tilde{L}}(kR)$  в выражениях (30) и (31). Так как в области  $R_* < R < 2n^2$  характерный размер осцилляций

$$\Delta R \approx \pi \frac{R^{1/2} (RE+1)^{1/2}}{\sqrt{2M_c} (2RE+1)}$$
(34)

существенно меньше длины волны электрона  $\lambda \approx n$ , на масштабе  $\lambda$  можно проводить соответствующее усреднение, переходя к плавной зависимости  $\Delta$  и  $\Gamma$  от R.

Осцилляции по E носят более сложный характер. Их можно разделить на три основных типа. К первому относятся резонансы, соответствующие полюсам  $\tilde{\mathbf{T}}$ -оператора столкновений электрона с ионным остовом  $A^+$  в матрице  $g_{ss}(R, \varepsilon_k)$ . При заданной начальной кинетической энергии  $E_k$  они расположены в интервале

$$-I_{\rm A} < E \le E_k$$

и, согласно (17), определяются из условия

$$\operatorname{tg}\left(\pi\nu(\varepsilon_k)\right) = -\operatorname{tg}(\pi\mu_l).$$

Положение резонансов описывается простой формулой

$$E_n^{(r)} = E_k - \frac{1}{2(n-\mu_l)^2}$$

в которой главное квантовое число меняется в пределах  $n_{min} \leq n < \infty$  (с минимальным значением

$$n_{min} \ge \hat{E}\left(1/\sqrt{2I_{\rm A}}\right),$$

где символ  $\hat{E}$  обозначает целую часть). Масштаб этих осцилляций  $\Delta E^{(1)} \sim 1/n^3$ .

Второй тип связан с поведением квадрата сферической функции Бесселя  $j_{\tilde{L}}^2(kR)$  в выражениях (31), (32). Их масштаб нетрудно оценить, полагая, что между соседними полюсами в интервале  $E_n^{(r)} < E < E_{n+1}^{(r)}$  матрица  $g_{ss}(R, \varepsilon_k)$  может быть вынесена из под интеграла по k. Тогда осцилляции будут определяться функциями sin  $(2k_{max}(E)R)$  (для четных  $\tilde{L}$ ) и cos  $(2k_{max}(E)R)$  (для нечетных  $\tilde{L}$ ), масштаб которых

$$\Delta E^{(2)} \approx \pi^2 / M_c R^2 \ll \Delta E^{(1)}.$$

Эта оценка справедлива для небольших значений  $n \ll [\Delta E^{(2)}]^{-1/3}$ . В противном случае будет наблюдаться сложная нерегулярная структура.

Третий тип осцилляций соответствует «биениям», которые возникают вследствие нарушения строгой компенсации кулоновских полюсов в асимптотической функции  $g_{ss}(R, \varepsilon_k)$  при  $R \leq n$  и приводят к расщеплению резонансных пиков. Естественно, что для чисто кулоновского случая ( $\mu_l = 0$ ) второе слагаемое в (19) обращается в нуль и «биения» должны пропадать.

Из выражений (30) и (31) следует, что при E = 0ширина  $\Gamma(E)$  не имеет особенностей, т. е. является аналитической функцией. Причем для положительных значений полной энергии усредненная по осцилляциям величина оказывается больше, чем для отрицательных. Это связано с появлением дополнительной (виртуальной) ионизации атома  $A^{**}$  при переходе через точку E = 0.

Нетрудно также видеть, что в пределе  $k \to 0$ величины сдвига и уширения ионного потенциала (независимо от знака полной энергии E) оказываются конечными. Физически этот результат понятен, так как при включении относительного движения атомов слабосвязанный электрон всегда имеет возможность осуществить виртуальный переход в нижележащее состояние (с меньшим значением n). Следует, однако, отметить, что при переходе к этому пределу необходимо выполнение дополнительного условия, связанного с требованием малости фазы рассеяния  $\eta_{\tilde{L}}$  в борновском приближении. Для поляризационного потенциала это выполняется только при  $\tilde{L} \geq 1$  [5].

#### 5. *К*-МАТРИЦА РАССЕЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА НА АТОМЕ В

Существуют два механизма взаимодействия медленных электронов с атомами — прямой и резонансный [14]. Прямой механизм (потенциальное или фоновое рассеяние) обычно описывается как

$$K_{LL}^{(0)}(\varepsilon, R) = -\frac{1}{p_e(R)} \operatorname{tg}\left(\delta_L(\varepsilon)\right), \qquad (35)$$

где  $\delta_L$  — фаза упругого рассеяния электрона, определенная при энергии, равной кинетической энергии электрона в точке расположения атома В. При малых энергиях  $\varepsilon^{1/2}|Q| \ll 1$  и  $\varepsilon\beta \ll 1$  (здесь Q и  $\beta$  квадрупольный момент и поляризуемость атома В) величина  $K_{LL}^{(0)}$  может быть представлена в следующем виде [15]:

$$K_{LL}^{(0)} = a\delta_{L0} - \frac{L(L+1) - 3M^2}{L(L+1)(2L-1)(2L+3)}Q(1-\delta_{L0}) - \frac{\pi p_e\beta}{(2L-1)(2L+1)(2L+3)} + \dots, \quad (36)$$

где a — длина рассеяния. Видно, что при L = 0 матричные элементы (36) обусловлены сферически-симметричной частью взаимодействия и зависят в основном от длины рассеяния. При  $L \neq 0$  они учитывают и анизотропную часть взаимодействия, что приводит к зависимости от квадрупольного момента Q. В рассматриваемом нами случае  $(n \gg 1)$  для элементов  $\mathbf{K}_{e^-}^{(0)}$ -матрицы можно воспользоваться длинноволновым (L = 0) разложением [16]:

$$K_{00}^{(0)}(R) = a + \frac{\pi\beta}{3} p_e(R) + \frac{4}{3}\beta p_e^2(R)a\ln p_e + \gamma p_e^2(R), \qquad (37)$$
$$p_e(R) = \left[\frac{2}{R} - \frac{1}{2\nu_l^2}\right]^{1/2},$$

где  $\gamma$  — коэффициент, значения которого для атомов инертных газов рассчитаны в [17].

При наличии резонансного механизма взаимодействия электрона с возмущающей частицей В оператор рассеяния может быть представлен в виде

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}^{(0)} + \mathbf{V} \frac{|\varphi_r\rangle \langle \varphi_r|}{E - E_r + 1/R} \mathbf{V}.$$
 (38)

Здесь  $|\varphi_r\rangle$  и  $E_r$  — волновые функции и энергия резонансного состояния квазимолекулы A<sup>+</sup>B, V — соответствующее взаимодействие. Полюсы второго слагаемого в (38) определяют положение термов ионной конфигурации

$$U^{(i)}(R) = E_r - 1/R.$$

Отметим, что оператор **K** задается единым образом для положительных и отрицательных энергий.

#### 6. СЕЧЕНИЕ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ

На небольших расстояниях  $R \sim R_{min}$  основной вклад в оптический потенциал (29) вносит обменное взаимодействие между ионом  $A^+$  и атомом B, поскольку фаза упругого рассеяния электрона  $\delta_L$  на атоме B быстро уменьшается с ростом кинетической энергии  $\varepsilon$  и матричный элемент (35) становится малым. Учитывая это обстоятельство, полное сечение упругого  $A^{**}$ –B-рассеяния удобно выразить следующим образом:

$$\sigma_{el} = \sum_{\bar{L}} \sigma_{\bar{L}} \approx 2\pi \frac{\tilde{L}_0^2}{k^2} + 4\pi \sum_{\bar{L}_0+1} \left( 2\tilde{L} + 1 \right) |f_{\bar{L}}|^2, \quad (39)$$

где угловой момент  $\tilde{L}_0$  определяется как  $\tilde{L}_0 = \hat{E}(kR_c(k))$ , символ  $\hat{E}$  означает целую часть от величины  $kR_c(k)$ , в которой  $R_c(k)$  — точка поворота на отталкивательной части потенциала  $U_{A+B}$  при заданной кинетической энергии системы  $E_k$ . Для парциальных амплитуд  $f_{\tilde{L}}$  естественно использовать борновское приближение в методе искаженных волн [21], записывая их в виде суммы двух слагаемых

$$f_{\bar{L}}(k) = f_{\bar{L}}^{(1)}(k) + f_{\bar{L}}^{(2)}(k).$$
(40)

Первое слагаемое соответствует случаю  $\Delta = \Gamma = 0$ и представляет собой амплитуду упругого рассеяния на поляризационной части потенциала  $U_{A+B}$ , т. е.

$$f_{\bar{L}}^{(1)}(k) = \frac{\exp\left(i\delta_{\bar{L}}^{(1)}(k)\right)\sin\left(\delta_{\bar{L}}^{(1)}(k)\right)}{k},\qquad(41)$$

где  $\delta_{\bar{L}}^{(1)}(k)$  — соответствующая фаза, которая при  $\tilde{L} > \tilde{L}_0$  может быть приведена к простой зависимости [5]:

$$\delta_{\bar{L}}^{(1)}(k) = -\frac{\pi M_c \beta k^2}{8\left(\tilde{L} + 1/2\right)^3}.$$
(42)

Сечение рассеяния в этом случае оказывается равным

$$\sigma_{el}^{(0)}(k) = \pi \left[\frac{\pi M_c \beta}{k}\right]^{2/3}.$$
(43)

Второе слагаемое в полной амплитуде (40) описывается выражением

$$f_{\bar{L}}^{(2)}(k) = -\frac{2M_c}{k^2} \int_{R_0}^{2n^2} u_{\bar{L}}^2(kR) \left[\Delta - i\frac{\Gamma}{2}\right] dR, \quad (44)$$

в котором нижний предел интегрирования выбирается из условия

$$U_{\mathbf{A}^+\mathbf{B}}(R_0) \ge \Delta(R_0)$$

2 ЖЭТФ, вып.6(12)

Функция  $u_{\tilde{L}}(kR)$  является решением радиального уравнения Шредингера с поляризационным взаимодействием и нормирована на асимптотику

$$u_{\tilde{L}}(kR) \propto \frac{1}{k} \sin\left(kR - \frac{\pi \tilde{L}}{2} + \delta_{\tilde{L}}^{(1)}\right)$$

Квадрат модуля полной амплитуды упругого рассеяния соответственно равен

$$|f_{\bar{L}}(k)|^{2} = (\operatorname{Re} f_{\bar{L}}(k))^{2} + (\operatorname{Im} f_{\bar{L}}(k))^{2}, \qquad (45)$$

где

$$\operatorname{Re} f_{\bar{L}}(k) = \frac{\sin \delta_{\bar{L}}^{(1)} \cos \delta_{\bar{L}}^{(1)}}{k} + \operatorname{Re} f_{\bar{L}}^{(2)}(k)$$
$$\operatorname{Im} f_{\bar{L}}(k) = \frac{\sin^2 \delta_{\bar{L}}^{(1)}}{k} + \operatorname{Im} f_{\bar{L}}^{(2)}(k).$$

# 7. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМА Na(nl) C АТОМАМИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Рассмотрим в качестве иллюстрации медленные столкновения ридберговских атомов Na<sup>\*\*</sup>(nl) с атомами инертных газов. Наибольший интерес (при заданных начальном возбуждении атома  $E_{n_0}$  и относительной энергии  $E_k$ ) представляют зависимости ширины ионного терма от полной энергии Е и межатомного расстояния *R*. Зависимость от главного квантового числа *п* промежуточных виртуальных состояний в этом случае воспроизводит энергетическую зависимость в точках  $E_n^{(r)}$ , расположенных в интервале  $n_0 \leq n < \infty$ , и большого интереса не представляет. Зависимость от углового момента электрона *l* является слабой. Ниже на примере  $Na^{**}(10s) + He$  мы ограничимся обсуждением зависимости  $\Gamma$  от энергии E, а для системы Na<sup>\*\*</sup> (10d) + В (где  $B = \{He, Ne, Ar, Kr, Xe\}$ ) проанализируем зависимость от R. Соответствующие расчеты проведены по формулам (30)–(33) с параметрами  $a, \beta$  и  $\gamma$  в разложении (37), взятыми из работы [18]. Значения этих параметров приведены в таблице. Для квантовых дефектов *s*-, *p*- и *d*-серий атома натрия приняты следующие величины:

$$\mu_s = 1.35, \quad \mu_p = 0.86, \quad \mu_d = 0.015,$$

которые найдены на основании спектроскопических данных Национального института стандартов и технологий (NIST Atomic Spectra Database Data).

Атом	a	β	$\gamma$
He	1.15	1.38	6.0
Ne	0.30	2.68	6.5
Ar	-1.69	11.08	-5.0
Kr	-3.20	16.74	-40.0
Xe	-6.00	27.06	-210.0

Параметры  $a, \beta$  и  $\gamma$  для атомов инертных газов



Рис. 1. Зависимость ширины оптического потенциала  $\Gamma$  от полной энергии E системы  $\mathrm{Na}^{**}(10s) + \mathrm{He}$ 

На рис. 1 изображена зависимость ширины ионного терма  $\Gamma$  от полной энергии системы E, построенная для следующих значений начальных данных:

$$E_k = 0.1904 \ \Im B, \quad n_0 = 10,$$
  
 $l = \tilde{L} = 0, \quad R \approx 5 \ \text{Å}.$ 
(46)

Как и следовало ожидать, осцилляции сходятся к пределу  $E_k$ . При небольших значениях n (в окрестности ридберговских  $E_n^{(r)}$ -резонансов, положение которых определяется полюсами матрицы  $g_{ss}(E)$  и обозначено стрелками) наблюдается расщепление соответствующих пиков. Между резонансами отчетливо видна тонкая структура осцилляций второго типа, минимумы которой расположены вблизи нулей функции sin  $\left[R\sqrt{2M_c(E+1/R)}\right]$ . С ростом n картина заметно усложняется.

Зависимости ширины  $\Gamma$  от межатомного расстояния R, рассчитанные для атомов инертных газов, приведены на рис. 2–6. Из этих рисунков следует, что ширина  $\Gamma(R)$  является осциллирующей функцией и быстро убывает с ростом R. Частота осцилляций, в соответствии с (34), растет с увеличением приведенной массы  $M_c$ . При этом заметно возрастает и



Рис.2. Зависимость ширины оптического потенциала  $\Gamma$  и взятого с обратным знаком ионного терма  $U_{\mathrm{Na+He}}$  от межатомного расстояния R в системе  $\mathrm{Na^{**}}(10d)$  + Не для  $E_k=0.19$  эВ и  $\tilde{L}=0$ . Гладкая кривая — ионный терм, осциллирующая — ширина  $\Gamma(R)$ 



сама ширина, что объясняется влиянием параметров  $a, \beta$  и  $\gamma$  (см. таблицу).

В качестве следующей иллюстрации на рис. 7 и 8 приведены зависимости сечения упругого рассеяния Na<sup>\*\*</sup>(ns) + Не от кинетической энергии  $E_k$ (для фиксированного главного квантового числа  $n_0 = 10$ ) и от номера уровня n (при заданной энергии  $E_k = 10^{-3}$  эВ), рассчитанные по формулам (39)–(45). Видно, что полное сечение рассеяния  $\sigma_{el}(E_k)$ , изображенное на рис. 7, является сильно осциллирующей функцией от кинетической энергии. В рассматриваемой области энергии эта структура



Рис.4. То же, что и на рис. 2 для системы Na\*\*(10*d*) + Ar



Рис.5. То же, что и на рис. 2 для системы  $Na^{**}(10d) + Kr$ 

определяется осцилляциями второго типа. Высота пиков превышает сечение Na<sup>+</sup>-He-рассеяния в пределах одного-двух порядков.

Зависимость сечения упругого рассеяния  $\sigma_{el}(n)$ от главного квантового числа (см. рис. 8) также является немонотонной функцией, которая в отдельных точках на три порядка превышает величину  $\sigma_{el}^{(0)}$ , равную  $10^{-13}$  см<sup>2</sup> при энергии  $E_k = 10^{-3}$  эВ. Масштаб этих осцилляций  $\Delta n \sim 10$ , поэтому перспективы их экспериментального наблюдения представляются вполне реальными. Причем наибольший интерес здесь представляет область сверхнизких температур, которая в настоящее время достаточно широко исследуется [22–25].

Естественным приложением развитой теории могут служить также расчеты неупругих и транспорт-



Рис.6. То же, что и на рис. 2 для системы  $Na^{**}(10d) + Xe$ 



Рис.7. Зависимость полного сечения упругого рассеяния Na<sup>\*\*</sup>(10s) + Не от кинетической энергии сталкивающихся частиц. Тонкая линия — результаты расчета с использованием оптического потенциала (29); жирная линия — сечение Na<sup>+</sup>-He-рассеяния (43)

ных сечений. Следующее важное приложение связано с использованием диффузионного подхода к описанию динамики столкновений ридберговских атомов [26], где электронный переход в элементарном акте столкновения атомов рассматривается как диффузия по энергетическим состояниям возбужденной квазимолекулы. При этом коэффициент диффу-



Рис. 8. Зависимость полного сечения упругого рассеяния  $Na^{**}(ns)$  + Не от главного квантового числа n

зии определяется вероятностью переходов в единицу времени и непосредственно связан с мнимой частью оптического потенциала (29). При отсутствии необходимой информации здесь возможна только грубая оценка.

#### 8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Возможность перехода от трехчастичной задачи к двухчастичной в рассмотренном случае объясняется прежде всего тем, что наибольший вклад в уширение и сдвиг ионного терма U<sub>A+B</sub> вносит область движения электрона вблизи атома В, которая много меньше межатомного расстояния R [7]. Следующим важным обстоятельством является то, что в системе А\*\* + В электрон является слабосвязанным и при взаимодействии с атомом В его можно рассматривать как свободную частицу. Наконец, масса электрона мала по сравнению с приведенной массой атомов, поэтому центр тяжести системы фактически расположен на соединяющей их оси. Введение оптического потенциала (учитывающего все возможные неадиабатические переходы) является удобным формальным приемом, который позволяет рассчитывать полные и дифференциальные сечения сечения процессов, протекающих вблизи ионизационного континуума, пользуясь стандартными методами квантовой теории рассеяния. Причем он вводится в той области спектра, где понятие потенциала ядер вообще лишено смысла, поскольку медленным здесь является электрон [4].

Мы ограничились анализом простейшей ситуации, когда атом В является бесструктурной частицей. Для атомов инертных газов это приближение вполне оправдано. Однако при рассмотрении более сложных атомов необходимо учитывать многоканальный характер движения электрона [18], связанный с возбуждением ионного остова, а также возможность его захвата с образованием ионной пары [19]. Последнее реализуется в случае положительного сродства атома В к электрону и может существенно изменить результирующую картину. Кроме того, следует иметь в виду возможность распада образующейся квазимолекулы А\* + В за счет предиссоциации, т.е. неадиабатического перехода в диссоциативную электронную конфигурацию А\* + В, сопровождающегося ускорением атомов [20]. Изучение этих вопросов выходит за рамки настоящей работы и требует дополнительных исследований.

Авторы выражают благодарность Ю. Н. Демкову и И. В. Комарову за обсуждение работы и полезные замечания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект 00-03-32102) и INTAS (грант 99-00039).

## ЛИТЕРАТУРА

- 1. Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков, Возбуждение атомов и уширение спектральных линий, Физматгиз, Москва (1979).
- 2. Ридберговские состояния атомов и молекул, под ред. Р. Стеббингса, Ф. Даннинга, Мир, Москва (1985).
- Д. Л. Мурс, Х. Э. Сараф, Теория квантового дефекта та и приложения, под ред. Ф. Г. Берка, В. Б. Эйснера, Д. Р. Хаммера, И. С. Персиваля, Мир, Москва (1986).
- 4. Г. В. Голубков, Г. К. Иванов, Ридберговские состояния атомов и молекул и элементарные процессы с их участием, УРСС, Москва (2001).
- 5. Н. Мотт, Г. Месси, *Теория атомных столкновений*, Мир, Москва (1969).
- А. З. Девдариани, В. И. Демидов, Н. Б. Колоколов, В. И. Рубцов, ЖЭТФ 84, 1648 (1983).
- G. V. Golubkov and G. K. Ivanov, Z. Phys. A **319**, 17 (1984).

- 8. А. С. Давыдов, *Квантовая механика*, Мир, Москва (1973).
- 9. М. Гольдбергер, К. Ватсон, *Теория столкновений*, Мир, Москва (1967).
- 10. G. V. Golubkov and G. K. Ivanov, J. Phys. B 17, 747 (1984).
- 11. Э. Т. Уиттекер, Дж. Н. Ватсон, *Курс современного* анализа, т. II, Физматгиз, Москва (1963).
- 12. Р. Ньютон, *Теория рассеяния волн и частиц*, Мир, Москва (1969).
- **13**. В. А. Алексеев, И. И. Собельман, ЖЭТФ **49**, 1274 (1965).
- 14. Г. Ф. Друкарев, Столкновения электронов с атомами и молекулами, Наука, Москва (1978).
- 15. Г. К. Иванов, Опт. и спектр. 43, 1044 (1977).
- T. O'Malley, L. Sprach, and L. Rosenberg, Phys. Rev. 125, 130 (1962).
- 17. Г. К. Иванов, Опт. и спектр. 40, 965 (1976).

- **18**. Е. М. Балашов, Г. В. Голубков, Г. К. Иванов, ЖЭТФ **103**, 374 (1993).
- **19**. Г. К. Иванов, Г. В. Голубков, Е. М. Балашов, ДАН СССР **323**, 311 (1992).
- 20. G. K. Ivanov and G. V. Golubkov, J. Phys. B 189, L383 (1985).
- 21. Дж. Тейлор, Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений, Мир, Москва (1975).
- 22. W. R. Anderson, J. R. Veale, and T. F. Gallagher, Phys. Rev. 80, 249 (1998).
- 23. R. Cote and A. Dalgarno, Phys. Rev. A 58, 498 (1998);
   62, 012709-1 (2000).
- 24. J. Weiner, V. S. Bagnato, S. Zilio et al., Rev. Mod. Phys. 71, 1 (1999).
- 25. W. C. Stwalley and H. Wang, J. Mol. Spectr. 195, 194 (1999).
- 26. А. З. Девдариани, А. Н. Ключарев, Н. П. Пенкин и др., Опт. и спектр. 64, 706 (1988).