

ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ КОМПОНЕНТАМИ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ
МЕДЛЕННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ НЕЙТРАЛЬНЫХ АТОМОВ

Б. П. Кавлакис, Д. П. Пресняков

УДК 539.186.1.

Задача о переходах между компонентами тонкой структуры формулируется в рамках метода сильной связи на основе адиабатического базиса. Рассматривается роль взаимодействия, вызванного вращением междуядерной оси. Результаты расчетов находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными.

Задача о переходах между компонентами тонкой структуры при медленных столкновениях нейтральных атомов имеет ряд физических особенностей, отсутствующих в задаче о возбуждении заряженными частицами. Прежде всего, для большого числа переходов, представляющих интерес в приложениях (резонансная флуоресценция и др.), действующие мультипольные взаимодействия не вносят вклада в оператор перехода между состояниями. Поэтому уже в нулевом приближении, т.е. в базисных волновых функциях, необходимо учитывать двухцентровой характер задачи и строить решение на основе квазимолекулярных волновых функций.

При такой постановке задачи переходы между уровнями одного из атомов обусловлены двумя механизмами: радиальным движением и вращением оси квазимолекулы /1-2/. В ряде случаев вращательный (коррелирующий) механизм является доминирующим.

Оператор вращательного взаимодействия имеет вид:

$$\hat{T}_{\Phi} = -\dot{\Phi}(\hat{L}_x + \hat{S}_x) = -\dot{\Phi}\hat{J}_x, \quad (1)$$

где L_x , S_x , J_x - компоненты операторов орбитального, спинового и полного моментов. Ось Z направлена вдоль оси квазимолекулы, X - ось относительного вращения, $\dot{\Phi}$ - угловая скорость вращения квазимолекулярной оси в неподвижной системе координат. Матричные элементы оператора (1) отличны от нуля для переходов между состояниями с различными проекциями момента на ось Z: $\Delta M =$

$= |M - M'| = 1$. Они имеют вид:

$$\langle M | \hat{T}_\Phi | M' \rangle = -v_1 \rho R^{-2}(t) \langle M | J_x | M' \rangle, \quad (2)$$

где v_1 - начальная скорость относительного движения, ρ - прицельный параметр, $R(t)$ - межатомное расстояние как функция от времени.

Для вычисления вероятности перехода необходимо знать $R(t)$ с учетом межатомного взаимодействия. Будем пользоваться модельным потенциалом межатомного отталкивания $V(R) = \alpha R^{-2}$. В этом случае $R(t)$ имеет вид:

$$R^2(t) = R_{\min}^2 + \rho^2 + v_1^2 t^2, \quad (3)$$

где $R_{\min} = \sqrt{\alpha/E_i}$ - расстояние наименьшего сближения атомов при "лобовом" столкновении; константа α определяется из поведения квазимолекулярных термов.

Вероятность перехода, вычисленная аналогично /3-4/, имеет вид:

$$W_{MM'} = \sin^2 \left[\pi \langle M | J_x | M' \rangle (\rho^2 + R_{\min}^2)^{-1/2} \right] \times \\ \times \exp \left[- (2\omega/v_1) (\langle M | J_x | M' \rangle v_1 \rho / \omega + \rho^2 + R_{\min}^2)^{1/2} \right], \quad (4)$$

Здесь ω - так называемый дефект резонанса - расстояние между начальным и конечным уровнями. Ввиду малости член $v_1 \langle M | J_x | M' \rangle \rho / \omega$ не дает существенного вклада и может быть опущен.

Сечение перехода между уровнями

$$\sigma_{MM'} = 2\pi \int_0^{R_{\max}} W_{MM'}(\rho) \rho d\rho. \quad (5)$$

R_{\max} определяется из условия $\Delta\varepsilon(R_{\max}) \approx \omega$, где $\Delta\varepsilon(R) = |\varepsilon_M(R) - \varepsilon_{M'}(R)|$ - разность значений межатомного взаимодействия в состояниях с различными M . При $\pi \langle M | J_x | M' \rangle \gg 1$ быстро осциллирующий квадрат синуса в (4) можно заменить его средним значением $1/2$. Сечение (5) имеет вид:

$$\sigma = \pi \left[(\nu_1/2\omega) R_{\min} + (\nu_1/2\omega)^2 \right] \exp(-2\omega R_{\min}/\nu_1) - \left[(\nu_1/2\omega) \sqrt{R_{\max}^2 + R_{\min}^2} + (\nu_1/2\omega)^2 \right] \exp \left(-2\omega \sqrt{R_{\max}^2 + R_{\min}^2} / \nu_1 \right). \quad (6)$$

В случае малости аргумента в (4) при всех ρ выражение для сечения также может быть записано в виде элементарных функций.

Модельный потенциал $V(R) = \alpha R^{-2}$ является дальнедействующим. Противоположным предельным случаем может служить классический поворот у стенки непроницаемой сферы радиуса R_{\min} . При этом

$$R^2(t) = R_{\min}^2 + (\sqrt{R_{\min}^2 - \rho^2} + \nu_1 |t|)^2, \quad \rho < R_{\min}, \quad (7)$$

$$R^2(t) = \rho^2 + \nu_1^2 t^2, \quad \rho \geq R_{\min}.$$

Сечение (5) в этом случае имеет вид

$$\sigma = 2\pi \sin^2 [\pi < M | J_x | M^* >] \left\{ \left[(\nu_1/2\omega) R_{\min} + (\nu_1/2\omega)^2 \right] \times \exp(-2\omega R_{\min}/\nu_1) - \left[(\nu_1/2\omega) R_{\max} + (\nu_1/2\omega)^2 \right] \times \exp(-2\omega R_{\max}/\nu_1) \right\} + (\pi/2) R_{\min}^2 \exp(-2\omega R_{\min}/\nu_1), \quad (8)$$

близкий к результату (6). В реальных условиях потенциал мезатомного отталкивания является промежуточным между двумя рассмотренными предельными случаями. Поэтому выражения (6) и (8) можно рассматривать как нижний и верхний пределы анализируемых сечений.

Таблица I

	Na - He	K - He	Rb - He	Rb - He	Cs - He
$\omega, \text{см}^{-1}$	I7	58	238	238	554
$\sigma_{\text{эксц}}, \text{см}^2$	$8,9 \cdot 10^{-15}$	$6,6 \cdot 10^{-15}$	$7,9 \cdot 10^{-18}$	$10^{-19} - 10^{-18}$	$5,7 \cdot 10^{-21}$
$\sigma_{\text{расч}}, \text{см}^2$	$1,38 \cdot 10^{-15}$	$1,64 \cdot 10^{-16}$	$1,64 \cdot 10^{-18}$	$4,75 \cdot 10^{-19}$	$6 \cdot 10^{-21}$
$\sigma_{\text{расч}}, \text{см}^2$	$2,88 \cdot 10^{-15}$	$3,46 \cdot 10^{-16}$	$5,2 \cdot 10^{-18}$	$1,7 \cdot 10^{-18}$	$3,2 \cdot 10^{-20}$

В таблице I дано сопоставление расчетов $\sigma(\langle v \rangle)$ по формулам (6) и (8) со средними значениями сечений $\bar{\sigma} = \langle \sigma v \rangle / \langle v \rangle$, измеренных экспериментально (см. /5-6/) для перехода $P_{1/2} - P_{3/2}$ щелочных металлов при столкновении с атомами инертного газа для области температур 300-450°K.

Сравнение с экспериментом показывает условия, при которых рассмотренный вращательный механизм вносит доминирующий вклад в процесс перехода. Для малых дефектов резонанса ($\omega < 100 \text{ см}^{-1}$) основным, по-видимому, является рассмотренный в /7,5/ механизм радиального движения атомов. В случае $\omega \geq 200 \text{ см}^{-1}$ эффективное сечение целиком определяется переходами, вызванными вращением межъядерной оси системы двух атомов.

Поступила в редакцию
29 декабря 1976 г.

Л и т е р а т у р а

1. Е. I. Dashevskaya, Е. Е. Nikitin, А. I. Reznikov, J. Chem. Phys., 52, 1175 (1970).
2. F. Maanou-Sleuws, R. McCaroll, J. Phys. B, Atom. Molec. Phys., 7, 2230 (1974).
3. Л. Вайнштейн, Л. Пресняков, И. Собельман, ЖЭТФ, 43, 518 (1962).
4. Л. П. Пресняков, Труды ФИАН, 30, 256 (1964).
5. Е. Е. Никитин, Теория элементарных атомно-молекулярных процессов в газах, М., "Химия", 1970 г.
6. R. E. Olson, Chem. Phys. Letters, 33, 250 (1975).
7. Е. Е. Никитин, Опт. и спектр., 22, 689 (1967).