

ЛЕНИНГРАДСКИЙ ОРДЕНА ЛЕНИНА И ОРДЕНА ТРУДОВОГО  
КРАСНОГО ЗНАМЕНИ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

УДК 539.186

Леднев Михаил Георгиевич

СТОЛКНОВЕНИЯ ВОЗБУЖДЕННЫХ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ  
АТОМОВ ВТОРОЙ И ВОСЬМОЙ ГРУПП С АТОМАМИ  
ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ: ИЗМЕНЕНИЕ МОМЕНТА, СПИНА  
И РАДИАЦИОННЫЙ РАСПАД МЕТАСТАБИЛЬНОГО  
СОСТОЯНИЯ

Специальность 01.04.08 - физика  
и химия плазмы, 01.04.05 - оптика

А в т о р е ф э р а т  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Ленинград

1991

Работа выполнена на кафедре оптики Ленинградского ордена Ленина и ордена Трудового Красного Знамени государственного университета и кафедре теоретической физики Ленинградского института точной механики и оптики.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук,  
профессор А.А.Киселев  
доктор физико-математических наук,  
старший научный сотрудник  
А.З.Девдариани

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,  
ведущий научный сотрудник  
Г.К.Иванов  
кандидат физико-математических наук,  
доцент А.Г.Петрашень

Ведущая организация:

Ленинградский институт авиационного  
приборостроения

Защита диссертации состоится " " 1991 г.  
в \_\_\_ часов на заседании специализированного совета К063.57.10  
по присуждению ученой степени кандидата физико-математических  
наук в Ленинградском государственном университете по адресу:  
199034, Ленинград, Университетская наб., 7/9.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ЛГУ.

Автограферат разослан " " 1991 г.

Ученый секретарь специализированного  
совета, кандидат физико-математических  
наук

Н.А.Тимофеев

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. Элементарные процессы при столкновениях возбужденных атомных частиц в значительной мере определяют физические свойства систем, содержащих низкотемпературную плазму. Возросший интерес к элементарным процессам с участием возбужденных атомов второй М и восьмой Х групп с атомами инертных газов в основном состоянии  $Y(^1S_0)$  связан с обсуждаемой в литературе возможностью создания лазеров на эксимерах MY и XY [1]. Оптимизация параметров таких систем, а также других установок, содержащих низкотемпературную плазму, требует детальной информации о протекающих в них элементарных процессах.

В последние годы в связи с развитием экспериментальной техники пересекающихся атомных пучков с лазерным возбуждением возрос интерес к элементарным процессам с участием поляризованных атомов. Особенностью таких процессов является возможность изменения сечения реакции путем вариации поляризации атомов. Анализ поляризационных зависимостей сечений позволяет получить дополнительную информацию о механизме реакции и характерных особенностях существенных для реакции квазимолекулярных термов.

Корректная обработка экспериментальных данных требует предварительного теоретического анализа, что определяет актуальность темы диссертации.

Теория медленных атомных столкновений строится на основе концепции квазимолекулярных состояний [2]. Поэтому необходимым этапом при теоретическом рассмотрении атомных столкновений является расчет квазимолекулярных термов системы сталкивающихся атомов. Вычисленные в диссертации адабатические термы возбужденных состояний квазимолекул  $M^*Y$ ,  $X^*Y$  представляют интерес как в связи с получением новой информации о термах возбужденных квазимолекул (для ряда пар  $Ba^*$ ,  $Zn^*$ ,  $Sr^*$  + He, Ne,  $Ne(2p^5 4p) + He$ ,  $Kr(4p^5 5p) + He$ , Ne адабатические термы получены впервые), так и с возможностью использования их для анализа различных элементарных процессов при атомных столкновениях или спектральных характеристик квазимолекул.

Цель работы. Целью настоящей диссертационной работы является расчет адиабатических термов возбужденных состояний квазимолекул  $M(n_0snp) + Y(^1S_0)$  и  $X(n_0p^5pr) + Y(^1S_0)$  и теоретический анализ на их основе ряда элементарных процессов при несимметричных столкновениях возбужденных поляризованных атомов  $M^*$  и  $X^*$  с атомами  $Y(^1S_0)$  в условиях газовой ячейки и пересекающихся атомных пучках.

Научная новизна. Большая часть имеющихся в литературе теоретических данных о потенциалах взаимодействия возбужденных атомов  $M^*$  и  $X^*$  с атомами  $Y(^1S_0)$  получены методом модельного потенциала и вариантов метода псевдопотенциала с полгоночными параметрами и зачастую недостаточно точны. Потенциалы взаимодействия атомов  $X^*$  с возбужденным электроном в  $p$ -состоянии ранее практически не исследовались. При получении теоретических оценок элементарных процессов при столкновениях  $M^*, X^*+Y$  использовались асимптотические и качественные представления о потенциалах взаимодействия атомов.

Научная новизна работы заключается в том, что:

1. Вычислены в рамках апробированного варианта метода псевдопотенциала без подгоночных параметров и с учетом взаимодействия различных конфигураций потенциалы взаимодействия атомов второй ( $Mg(3p)$ ,  $Ca(4p)$ ,  $Ca(5p)$ ,  $Zn(4p)$ ,  $Sr(5p)$ ,  $Cd(5p)$ ,  $Hg(6p)$ ,  $Ba(6p)$ ) и восьмой ( $Ne(3p)$ ,  $Ne(4p)$ ,  $Ar(4p)$ ,  $Kr(5p)$ ) групп с атомами  $He$  и  $Ne$ . Для систем  $Hg(6p) + Ar$ ,  $Kr$ ,  $Xe$  потенциалы взаимодействия восстановлены из имеющихся в литературе экспериментальных данных. При расчете квазимолекулярных термов учитывался промежуточный тип связи угловых моментов в возбужденных атомах  $M^*$  и  $X^*$ .

2. Вычислены с учетом обменного взаимодействия усредненные по максвелловскому распределению сечения деполяризации возбужденных атомов второй  $M^*$  и восьмой  $X^*$  групп при столкновениях с атомами  $He$  и  $Ne$ .

3. Выполнен теоретический анализ процесса изменения спинового состояния при столкновениях поляризованных атомов  $Ca(4s5p^1P_1)$  с атомами  $He$  и  $Ne$  с учетом особенностей структуры квазимолекулярных термов и многократных пересечений.

4. Выполнен анализ и вычислены температурные зависимости радиационного распада метастабильных состояний атомов Cd( $5^3P_2$ ) и Hg( $6^3P_2$ ) при столкновениях с атомами инертных газов Ne, Ar, Kr, Xe. Вычислены спектральные распределения фотонов, излучаемых при радиационном распаде.

5. Рассмотрено влияние поляризации возбужденных атомов Cd( $5^3P_2$ ) и Hg( $6^3P_2$ ) на сечения и спектральные распределения фотонов реакции радиационного распада метастабильного состояния  $^3P_2$ .

Практическая ценность. Полученные в диссертации результаты могут быть использованы в исследованиях и разработках, связанных с применением смесей MX и XY для оптимизации параметров лазерных сред, при анализе процессов в низкотемпературной плазме, при разработке различных установок, содержащих плазму. Самостоятельное значение имеют полученные в диссертации адиабатические квазимолекулярные термы систем M $^*$  + Y и X $^*$  + Y. Вычисленные термы могут послужить основой для анализа спектральных характеристик квазимолекул и различных элементарных процессов при медленных атомных столкновениях, в частности, процессов, связанных с переходами между компонентами тонкой структуры атомов M( $n_0snp$ ) и уровнями конфигурации X( $n_0p^5$ пр) при столкновениях с атомами He и Ne.

На защиту выносятся:

1. Расчет адиабатических термов нижних возбужденных состояний квазимолекул Mg(3p), Ca(4p), Ca(5p), Zn(4p), Sr(5p), Cd(5p), Hg(6p), Ba(6p) + He, Ne. Полузэмпирические потенциалы взаимодействия Hg( $6s6p^3P_J$ ) с атомами Ar, Kr, Xe.
2. Расчет адиабатических термов гетероядерных квазимолекул инертных газов Ne( $2p^53p$ ), Ne( $2p^54p$ ) + He, Ar( $3p^54p$ ), Kr( $4p^55p$ ) + He, Ne.
3. Вычисленные усредненные по максвелловскому распределению значения величин сечений деполяризации (разрушения ориентации  $\langle \mathcal{G}_J^{(1)}(T) \rangle$  и выстраивания  $\langle \mathcal{G}_J^{(2)}(T) \rangle$ ) возбужденных атомов второй M( $n_0snp$ ) и восьмой X( $n_0p^5$ пр) групп при столкновениях с атомами He и Ne.

4. Теоретический анализ процесса изменения спинового состояния при столкновениях возбужденных поляризованных атомов  $\text{Ca}(4s5p^1P_1)$  с атомами He и Ne с учетом особенностей структуры квазимолекулярных термов и многократных пересечений.

5. Теоретический анализ процесса радиационного распада метастабильного состояния  ${}^3P_2$  при столкновениях  $\text{Cd}(5{}^3P_2)$ ,  $\text{Hg}(6{}^3P_2)$  с атомами He, Ne, Ar, Kr, Xe, радиационные ширины низших возбужденных состояний квазимолекул  $\text{Cd}(5s5p)$ ,  $\text{Hg}(6s6p) + \text{He}$ , Ne, Ar, Kr, Xe, температурные зависимости усредненных по максвелловскому распределению сечений  $\langle S_{\text{rad}}(T) \rangle$  и спектральные распределения фотонов, излучаемых в процессе столкновительно-индуцированного распада метастабильного состояния атомов  $\text{Cd}(5{}^3P_2)$  и  $\text{Hg}(6{}^3P_2)$  в инертных газах.

6. Анализ влияния поляризации возбужденных атомов  $\text{Cd}(5{}^3P_2)$  и  $\text{Hg}(6{}^3P_2)$  на сечения и спектральные распределения фотонов, индуцированного столкновениями с атомами инертных газов, процесса радиационного распада метастабильного состояния  ${}^3P_2$ .

Апробация результатов. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на X Всесоюзной конференции по электронным и атомным столкновениям (Ужгород, 1988), XX Всесоюзном съезде по спектроскопии (Киев, 1988), IX Международной конференции по форме спектральных линий (Торунь, 1988, Польша), XX совещании Европейской группы по атомной спектроскопии (Грац, Австрия, 1988), XVI Международной конференции по электронным и атомным столкновениям (Нью-Йорк, США, 1989), II Всесоюзном семинаре по оптической ориентации атомов и молекул (Ленинград, 1989).

Публикации. По материалам диссертации опубликовано одиннадцать работ.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения, содержит 35 рисунков, 21 таблицу, 2 приложения и список литературы из 128 наименований.

#### СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснованы выбор темы и актуальность диссертации, сформулированы решаемые задачи, приведены защищаемые

положения.

Каждая глава содержит краткий обзор имеющихся экспериментальных и теоретических данных по рассматриваемым квазимолекулам и элементарным процессам.

В первой главе в рамках метода эффективного гамильтониана [3] выполнен расчет адиабатических термов низких возбужденных состояний квазимолекул  $M(n_0snp) + Y(^1S_0)$   $M$  - возбужденный атом второй группы,  $Y$  - атом инертного газа в основном состоянии.

Потенциалы взаимодействия возбужденных атомов  $M(n_0snp)$  с атомами Не и Ne без учета спин-орбитального расщепления вычислены методом псевдопотенциала, предложенным в работе [4] и обобщенным в [5] на случай волновой функции возбужденного электрона произвольного вида (параграф 1.2). При расчете учитывалось, связанное с межатомным взаимодействием, наложение различных электронных конфигураций атома  $M^*$ .

Далее, в параграфе 1.3 рассмотрен метод эффективного гамильтониана [3] для расчета адиабатических термов квазимолекулы  $M(n_0sp) - Y(^1S_0)$ . Матричные элементы эффективного гамильтониана  $\hat{H}_{M^*Y}^{eff}$  вычислены в базисе квазимолекулярных волновых функций промежуточного типа связи угловых моментов. Конкретные расчеты адиабатических термов, коррелирующих в пределе разъединенных атомов с уровнями конфигурации  $n_0snp$ , выполнены для квазимолекул  $Mg(3p)$ ,  $Ca(4p)$ ,  $Ca(5p)$ ,  $Zn(4p)$ ,  $Sr(5p)$ ,  $Cd(5p)$ ,  $Hg(6p)$ ,  $Ba(6p) + He$ ,  $Ne$ . Обсуждается отличие вычисленных адиабатических термов квазимолекул  $Cd^*$ ,  $Hg^* + He$ ,  $Ne$  от имеющихся в литературе [6] (рис.1).

В случае взаимодействия возбужденных атомов  $M^*$  с атомами тяжелых инертных газов Ar, Kr, Xe метод псевдопотенциала (параграф 1.2) неприменим. В параграфе 1.4 получены полуэмпирические адиабатические термы квазимолекул  $Hg(6s6p) + Ar$ ,  $Kr$ ,  $Xe$  с использованием экспериментальных потенциалов взаимодействия атомов  $Hg(6s6p\ ^3P_1) + Ar$ ,  $Kr$ ,  $Xe$  в состояниях  $^30^+$  и  $^31$ .

Во второй главе диссертационной работы вычислены и проанализированы адиабатические термы гетероядерных квазимолекул

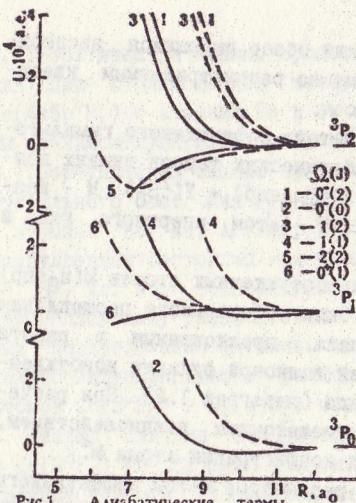


Рис.1 Адиабатические термы  $U_{\sigma}(R)$  квазимолекулы  $Hg(6s) + He$ . Штриховые кривые - расчет с потенциалами [6].

инертных газов  $Ne(2p^53p)$ ,  $Ne(2p^54p) + He$ ,  $Ar(3p^54p)$ ,  $Kr(4p^55p) + He$ ,  $Ne$ .

Расчет выполнен в рамках метода эффективного гамильтонiana в формулировке [7] (параграф 2.2) с учетом сильного отклонения от  $jK$ -типа связи в возбужденном атоме инертного газа и экспериментальных и полуэмпирических потенциалов ион-атомного взаимодействия.

В параграфе 2.3 в рамках метода псевдопотенциала с учетом взаимодействия различных электронных конфигураций атома  $X^*$  вычислены матричные элементы  $U_{\sigma}$  и  $U_{\pi}$  части оператора межатомного взаимодействия, действующего на волновую

функцию возбужденного электрона и получены матричные элементы  $V_{\sigma}$  и  $V_{\pi}$  оператора ион-атомного взаимодействия.

Вычисленные матричные элементы взаимодействия  $Ar(4p) + He$  хорошо согласуются с результатами значительно более трудоемкого расчета [8] в рамках метода модельного потенциала, что свидетельствует о надежности полученных результатов.

В параграфе 2.4 приведены результаты расчета (рис.2) и выполнен анализ характерных особенностей адиабатических термов квазимолекул  $Ne(2p^53p)$ ,  $Ne(2p^54p) + He$ ,  $Ar(3p^54p)$ ,  $Kr(4p^55p) + He$ ,  $Ne$ .

Полученные в главах 1 и 2 адиабатические термы используются далее для анализа ряда элементарных процессов.

В третьей главе диссертационной работы рассмотрены процессы деполяризации возбужденных атомов второй  $M(n_0snp)$  и восьмой  $X(n_0p^5np)$  групп при столкновениях с атомами  $He$  и  $Ne$ .

Теоретические оценки сечений деполяризации, полученные

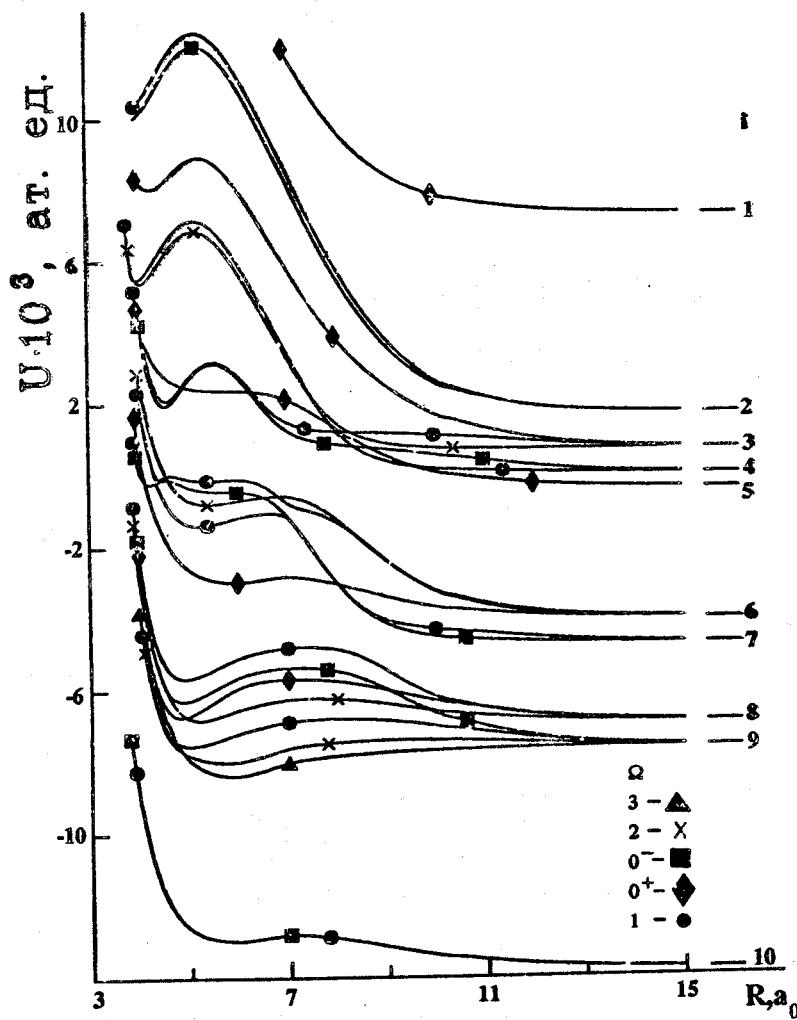


Рис.2. Адиабатические термы квазимолекулы  $\text{Ag}(3p^54p)$  - He.

в ряде работ, с учетом только дисперсионного взаимодействия атомов (в случае, когда Y = He или Ne) показали недостаточность такого приближения и необходимость учета обменного взаимодействия атомов, что и выполнено в данной работе.

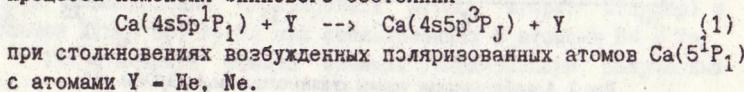
В параграфе 3.1 рассмотрен метод сшивки [9] для расчета сечений деполяризации (разрушения ориентации  $\langle \hat{G}_j^{(1)} \rangle$  и выстраивания  $\langle \hat{G}_j^{(2)} \rangle$ ). Метод сшивки дает надежные результаты при вычислении полных сечений деполяризации в том случае, если для определяющих величину сечения параметров удара точка поворота (или другие области неадиабатичности) и область изменения типа связи разделены широкой областью адиабатического развития.

Результаты расчетов сечений деполяризации атомов M\* и X\* при столкновениях с атомами He и Ne приведены в параграфе 3.2 (некоторые результаты приводятся в Таблице 1). Отмечается хорошее согласие результатов расчета с экспериментальными данными.

Таблица 1. Усредненные по максвелловскому распределению сечения разрушения выстраивания  $\bar{G}_j^{(2)}(T)$ , (в  $\text{A}^2$ ).

Y M*, X*	He			Ne		
	теор.	эксп.	T, K	теор.	эксп.	T, K
Zn( $4^3P_1$ )	45	49±5	570	59	50±5	570
Sr( $5^3P_1$ )	66	91±4	500	50	102±14	500
Hg( $6^3P_1$ )	44	39±2	250	69	47±3	250
Hg( $6^1P_1$ )	90	97±10	240	122	75±9	200
Ar( $4p.2p_3$ )	148	135±7	380	112	132±7	380
Ar( $4p.2p_7$ )	113	112±6	380	91	104±5	380

В четвертой главе диссертационной работы выполнен анализ процесса изменения спинового состояния



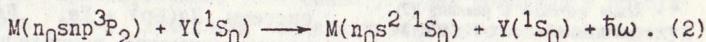
В параграфе 4.2 с использованием вычисленных в Главе 1 адиабатических термов выполнен анализ реакции (1) с учетом многократного пересечения термов и потенциальных барьеров, что существенно уточняет простую модель реакции (1), предложенную в [10].

Сечения реакции (1) для различных энергий столкновения вычислены в параграфе 4.3. Для соответствующей условиям эксперимента степени поляризации 1 атомов  $\text{Ca}(5^1\text{P}_1)$  и энергии столкновения  $E$  вычисленные отношения минимального сечения реакции (1) к максимальному (при вариации поляризации атомов  $\text{Ca}(5^1\text{P}_1)$ ) согласуются с экспериментальными значениями:

$$\frac{\sigma_{\text{теор.}}}{\sigma_{\text{He}}} = \frac{\sigma_{\min}}{\sigma_{\max}} = 0.49 \pm 0.06, \quad \frac{\sigma_{\text{эксп.}}}{\sigma_{\text{He}}} = 0.67 \pm 0.20,$$
$$\frac{\sigma_{\text{теор.}}}{\sigma_{\text{Ne}}} = 0.52 \pm 0.06, \quad \frac{\sigma_{\text{эксп.}}}{\sigma_{\text{Ne}}} = 0.58 \pm 0.20.$$

Обсуждается механизм реакции (1) при столкновениях с атомами Ar, Kr, Xe.

В пятой главе диссертационной работы выполнен анализ, индуцированного столкновениями с атомами инертных газов, процесса радиационного распада метастабильного состояния атомов  $\text{Cd}(5^3\text{P}_2)$  и  $\text{Hg}(6^3\text{P}_2)$



Радиационный распад метастабильного состояния (2) является одним из каналов гибели метастабильного состояния  $^3\text{P}_2$  (в некоторых случаях основным) и обусловлен примешиванием (в следствии межатомного взаимодействия) к адиабатической квазимолекулярной волновой функции метастабильного состояния волновых функций резонансных состояний.

В параграфе 5.2 вычислены радиационные ширины нижних возбужденных состояний квазимолекул  $\text{Cd}(5\text{s}5\text{p})$ ,  $\text{Hg}(6\text{s}6\text{p}) + \text{He}$ ,  $\text{Ne}$ , Ar, Kr, Xe и температурные зависимости усредненных по максвелловскому распределению сечений  $\langle G_{\text{rad}}(T) \rangle$  процесса (2) для предельных случаев высокого и низкого давления буферного газа. Отмечается разный характер температурных зависимостей сечений  $\langle G_{\text{rad}}(T) \rangle$ . В пределе высоких давлений при  $T < U_m/k$  ( $U_m$  - глубина потенциальной ямы на излучающем квазимолекулярном терме)  $\langle G_{\text{rad}}(T) \rangle$  сильно зависит от температуры. Это

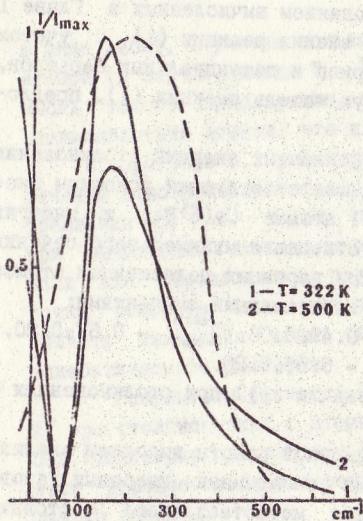


Рис.3 Спектральные распределения фотонов в реакции (2) при столкновениях  $\text{Hg}(6\frac{3}{2}P^+)$  + Xe. Штриховая линия - эксперимент.

хорошо согласуется с экспериментальной ( $\lambda_{\max}^{\text{теор.}} = 226.3 \text{ нм}$ ,  $\lambda_{\max}^{\text{эксп.}} = 226.0 \text{ нм}$ ). В то же время ширина на полувысоте вычисленного спектрального распределения в два раза меньше экспериментальной ширины. Обсуждается влияние на форму спектрального распределения фотонов температуры и давления газовой смеси.

В параграфе 5.4 выполнен анализ влияния поляризации возбужденных атомов  $\text{Cd}(5^3P_2)$  и  $\text{Hg}(6^3P_2)$  на сечения и спектральные распределения фотонов реакции радиационного распада (2). Установлено, что реакция (2) наиболее эффективна при столкновениях с единичной проекцией ( $|M_v| = 1$ ) момента  $J$  на направление начальной относительной скорости и наименее эффективна для столкновений  $|M_v| = 2$ . Отношение

$\sigma_{|M_v|=1} / \sigma_{|M_v|=2}$  слабо зависит от энергии столкновения  $E$  и возрастает при переходе от легких инертных газов к тяжелым

обстоятельство связано с быстрым увеличением заселенности связанных состояний, возникающих в эффективном потенциале с понижением температуры. Вычисленные сечения согласуются с первыми экспериментальными данными для систем  $\text{Hg}^* + \text{Xe}$  [11].

Процесс радиационного распада метастабильного состояния сопровождается излучением фотонов с энергией, близкой к энергии запрещенного атомного перехода  $3^3P_2 - 1^1S_0$ . Расчеты спектральных распределений фотонов выполнены в полуклассическом франк-кондновском приближении (параграф 5.3) и приведены на рис.3 для системы  $\text{Hg}(6p) + \text{Xe}$ . Длина волны максимума вычисленного спектрального распределения

(Таблица 2).

Таблица 2. Сечения реакции (2) для поляризованных  $\bar{\sigma}_{|Mv|}$  и неполяризованных  $\bar{\sigma}$  атомов  $Hg(6^3P_2)$  при столкновениях с атомами He и Xe (в  $\text{Å}^2$ ).

$Y$	$E, \text{эВ}$	$\bar{\sigma}_0$	$\bar{\sigma}$	$\bar{\sigma}_2$	$\frac{\bar{\sigma}_{\max}}{\bar{\sigma}_{\min}}$	$\bar{\sigma}$
He	0.05	$1.6 \cdot 10^{-7}$	$2.8 \cdot 10^{-7}$	$6.9 \cdot 10^{-8}$	4.0	$1.7 \cdot 10^{-7}$
	0.25	$8.5 \cdot 10^{-7}$	$1.7 \cdot 10^{-6}$	$3.5 \cdot 10^{-7}$	4.9	$1.0 \cdot 10^{-6}$
Xe	0.05	$1.5 \cdot 10^{-6}$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$5.2 \cdot 10^{-7}$	21	$5.1 \cdot 10^{-6}$
	0.25	$2.4 \cdot 10^{-6}$	$2.0 \cdot 10^{-5}$	$8.4 \cdot 10^{-7}$	24	$9.0 \cdot 10^{-6}$

Экспериментальные данные по радиационному распаду поляризованных атомов  $M(3^3P_2)$  в литературе отсутствуют.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе:

1. В рамках многоконфигурационного метода эффективного гамильтониана с использованием метода псевдоатома и с учетом промежуточного типа связи угловых моментов в возбужденном атоме вычислены адиабатические термы квазимолекул  $Mg(3p)$ ,  $Ca(4p)$ ,  $Ca(5p)$ ,  $Zn(4p)$ ,  $Sr(5p)$ ,  $Cd(5p)$ ,  $Hg(6p)$ ,  $Ba(6p)$  + He, Ne. Для систем  $Zn(4p)$ ,  $Sr(5p)$ ,  $Ba(6p)$  + He, Ne расчеты потенциалов взаимодействия выполнены впервые. Получены полуэмпирические термы квазимолекул  $Hg(6p)$  + Ar, Kr, Xe.

2. Получены выражения для матричных элементов и вычислены адиабатические термы квазимолекул  $Ne(2p^53p)$ ,  $Ne(2p^54p)$  + He,  $Ar(3^54p)$ ,  $Kr(4p^55p)$  + He, Ne с учетом сильного отклонения от jK-связи угловых моментов в возбужденном атоме и имеющихся в литературе экспериментальных и полуэмпирических потенциалов ион-атомного взаимодействия. Для систем  $Ne(2p^54p)$  + He,  $Kr(4p^55p)$  + He, Ne расчеты термов выполнены впервые.

3. В приближении внезапного изменения типа связи рассчитаны усредненные по максвелловскому распределению сечения разрушения ориентации  $\langle \bar{\sigma}_j^{(1)} \rangle$  и выстраивания  $\langle \bar{\sigma}_j^{(2)} \rangle$  возбужденных

атомов второй и восьмой групп при столкновениях с атомами Не и Ne. Показано, что для анализа процессов деполяризации существенно впервые учтенное обменное взаимодействие атомов. Вычисленные сечения согласуются с экспериментальными данными.

4. Выполнен анализ процесса изменения спинового состояния при столкновениях возбужденных поляризованных атомов Ca( $5^1P_1$ ) с атомами Не и Ne. Впервые рассмотрены столкновения с атомами Ne и учтены особенности структуры квазимолекулярных термов (многократных пересечений и потенциальных барьеров). Вычисленные отношения минимального сечения к максимальному (при вариации поляризации атомов Ca( $5^1P_1$ )) согласуются с экспериментальными. Обсуждается механизм реакции при столкновениях атомов Ca( $5^1P_1$ ) с атомами Ar, Kr, Xe.

5. Выполнен анализ и рассчитаны температурные зависимости в предельных случаях высокого и низкого давления буферного газа, усредненных по максвелловскому распределению сечений радиационного распада  $\langle G_{rad}(T) \rangle$  метастабильного состояния  $^3P_2$  атомов Cd и Hg при столкновениях с атомами инертных газов. При низких давлениях расчеты выполнены впервые.

6. Вычислены спектральные распределения фотонов, излучаемых в процессе столкновительно-индуцированного радиационного распада метастабильного состояния  $^3P_2$  атомов Cd и Hg в инертных газах. Обсуждаются особенности спектральных распределений в зависимости от температуры и давления газовой смеси.

7. Впервые выполнен анализ влияния поляризации возбужденных атомов Cd( $5^3P_2$ ) и Hg( $6^3P_2$ ) на сечение и спектральные распределения фотонов, индуцированных столкновениями с атомами инертных газов радиационного распада метастабильного состояния. Показано, что отношение максимального сечения к минимальному (при вариации поляризации атомов Cd\* и Hg\*) слабо зависит от энергии столкновения и возрастает при переходе от столкновений с легкими атомами инертных газов к столкновениям с тяжелыми.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Девдариани А.З., Загребин А.Л., Леднев М.Г. Изменение спи-

- нового состояния при столкновениях поляризованных атомов Ca( $5^1P_1$ ) с атомами He и Ne. // Опт.и спектроскопия. 1988. Т.65. В.3. С.514-522.
2. Девдариани А.З., Загребин А.Л., Леднев М.Г., Павловская Н.А. Столкновительно-индуцированные сателлиты запрещенных атомных линий. - В кн.: XX съезд по спектроскопии (Киев, 1988). Тезисы докладов. С.41.
3. Загребин А.Л., Леднев М.Г. Взаимодействие атомов Ne(3p) + He и процессы столкновительной деполяризации. // В кн.: X Всесоюзная конференция по физике электронных и атомных столкновений (Ужгород, 1988). Тезисы докладов. Часть 2. С.18.
4. Devdariani A.Z., Zagrebin A.L., Lednev M.G., Pavlovskaia N.A. Collision-induced Satellites of Forbidden Atomic Lines Transitions  ${}^3P_2-{}^1S_0$ . // In: IX-th International Conference on Spectral Line Shapes. Abstract of Contributed papers. Torun. 1988. P.D21.
5. Devdariani A.Z., Zagrebin A.L., Lednev M.G., Pavlovskaia N.A. Collision-induced Satellites of Forbidden Atomic Lines Transitions  ${}^3P_2-{}^1S_0$ . // In: XX-th European Group for Atomic Spectroscopy. Abstract. Graz. 1988. P.465-467.
6. Загребин А.Л., Леднев М.Г., Павловская Н.А. Сечения деполяризации при несимметричных столкновениях атомов инертных газов. // II Всесоюзный семинар по оптической ориентации атомов и молекул. Ленинград. 1989. Тезисы докладов. С.145.
7. Devdariani A.Z., Zagrebin A.L., Lednev M.G., Pavlovskaia N.A. Radiative Decay of Metastable  ${}^3F_2$ -states in Slow Atomic Collisions.//Abstr. Papers XVI ICPEAC, New York. 1989. P.70J.
8. Devdariani A.Z., Zagrebin A.L., Lednev M.G., Tcherkowny S.I. Nonadiabatic Transitions in Slow Collisions of Polarized Atoms.  
//Abstr. Papers XVI ICPEAC, New York. 1989. P.719.
9. Загребин А.Л., Леднев М.Г. Столкновительно-индуцированный сателлит запрещенной линии Hg6 ${}^3P_2-{}^1S_0$  и распад метастабильного состояния Hg( $6^3P_2$ ) в инертных газах. // Письма в ЖТФ. 1989. Т.15. В.24. С.11-15.

10. Загребин А.Л., Леднев М.Г. Взаимодействие атомов Ne( $2p^53p$ ) - Не и процессы столкновительной деполяризации. // Химическая физика. 1990. Т.9. № 3. С.307-315.
11. Загребин А.Л., Леднев М.Г. Столкновительно-индуцированные спектры паров кадмия с инертными газами вблизи запрещенной линии Cd( $5^3P_2 - 5^1S_0$ ) и тушение метастабильного состояния Cd( $5^3P_2$ ). // Журнал прикладной спектроскопии. 1990. Т.53. № 3. С.426-432.

Список цитируемой литературы

1. Кросс М., Ми Ф. Электронная структура и излучение эксимерных систем. // В кн.: Эксимерные лазеры. М.: Мир. 1981. С.20-69.
2. Никитин Е.Е. Теория элементарных атомно-молекулярных реакций. // Новосибирск: Изд-во Новосибирского гос.ун-та, 1970.
3. Никитин Е.Е., Уманский С.Я. Полуэмпирические методы расчета взаимодействия атомов. М.: ВИНИТИ, 1980.
4. Иванов Г.К. Теор.и эксперим.химия. 1978. Т.14. С.610-616.
5. Беляев А.К., Загребин А.Л., Церковный С.И.// Хим.физика. 1989. Т.8. С.435-441.
6. Czuchaj E., Stoll H., Preuss H.//J. Phys. B.: At. Mol. Phys. 1987. V.B20. P.1487-1507.
7. Девдариани А.З., Загребин А.Л.// Хим.физика. 1985. Т.4. С.739-749.
8. Kucal H., Hennecart D., Masnou-Seeuws F.//Z. Phys. D.: At. Mol. Clust. 1989. V.D13. P.241-254.
9. Дашевская Е.И., Мохова Н.А.// Опт.и спектроскопия. 1972. Т.33. С.817-824.
10. Девдариани А.З., Загребин А.Л.// Хим.физика 1987. Т.6. С.561-572.
11. Callear A.B., Du K.// Chem. Phys. 1987. V.113. P.73-86.