

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Физический Институт имени П.Н.Лебедева
Российской Академии Наук»

На правах рукописи

Кислов Константин Сергеевич

**Резонансные процессы неадиабатического обмена энергии
электронов и фотонов с молекулярными ионами в плазме
инертных газов**

Специальность 01.04.05 — оптика

**Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Научный руководитель

д.ф.-м.н. **Лебедев Владимир Сергеевич**

Научный консультант

к.ф.-м.н. **Нариц Александр Александрович**

Москва – 2020 г.

Содержание

Введение	6
Глава 1. Обзор современного состояния исследований	15
1.1. Классификация рассматриваемых в диссертации радиационных и столкновительных процессов	15
1.2. Фотодиссоциация молекулярного иона	18
1.3. Связанно-связанные и свободно-связанные переходы электрона в процессах с участием и образованием ридберговских атомов . . .	20
1.3.1. Основные свойства ридберговских атомов	20
1.3.2. Переходы между ридберговскими уровнями	22
1.3.3. Захват электронов атомарными ионами на высоковозбужденные уровни в тройных столкновениях с нейтральными и заряженными частицами	26
1.4. Диссоциативная рекомбинация молекулярных ионов с электронами с образованием атомов в слабозвужденных и ридберговских состояниях	28
1.4.1. Теоретические модели диссоциативной рекомбинации . . .	30
1.4.2. Диссоциативная рекомбинация гетероядерных ионов инертных газов	34
1.5. Прямое диссоциативное возбуждение молекулярных ионов электронным ударом	36
Глава 2. Нерезонансный захват электрона ионом в тройных столкновениях с нейтральными частицами	38
2.1. Нерезонансный механизм захвата электрона и соотношение детального баланса	38
2.2. Общее выражение для сечения нерезонансного захвата электрона ионом в импульсном приближении	39

2.3.	Аналитические выражения для сечений и констант скоростей трехчастичного захвата в приближении длины рассеяния	41
2.4.	Критерии применимости теории	44
2.5.	Выводы	45

Глава 3.	Резонансный захват электронов атомарными и молекулярными ионами в ридберговские состояния	46
3.1.	Предварительные замечания	46
3.2.	Постановка задачи. Исходные формулы	49
3.3.	Расчет эффективных сечений резонансного захвата электронов в рамках теории неадиабатических переходов	51
3.3.1.	Сечение трехчастичного захвата электронов атомарными ионами при столкновениях с нейтральными частицами	52
3.3.2.	Усредненные по больцмановскому распределению сечения диссоциативной рекомбинации	54
3.4.	Константы скорости резонансного захвата электронов в ридберговские состояния в двухтемпературной плазме	57
3.4.1.	Резонансная тройная рекомбинация	57
3.4.2.	Диссоциативная рекомбинация в условиях возбуждения всего колебательно-вращательного квазиконтинуума	59
3.4.3.	Суммарный вклад непрерывного и дискретного спектров в полную скорость резонансного захвата электрона	60
3.5.	Ширины автоионизационного распада ридберговских состояний квазимолекулы	63
3.6.	Результаты и обсуждение	66
3.6.1.	Зависимости эффективных сечений резонансного захвата электрона от главного квантового числа	67
3.6.2.	Константы скорости резонансного захвата в зависимости от главного квантового числа и температур T и T_e	69
3.6.3.	Анализ эффективностей резонансных процессов диссоциативного и трехчастичного захвата электронов	71
3.6.4.	Сравнение результатов расчета коэффициента диссоциативной рекомбинации с литературными данными	75
3.6.5.	Сравнение эффективности резонансного трехчастичного захвата электронов с альтернативными механизмами	79

3.6.6. Диссоциативный захват электронов гетероядерными и го- моядерными ионами	84
3.7. Итоги расчетов и теоретического анализа	88

Глава 4. Переходы между ридберговскими уровнями атомов при столкновениях с электронами и нейтральными частицами 92

4.1. Предварительные замечания	92
4.2. Сечение и константа скорости неадиабатического перехода $n \rightarrow n'$ между ридберговскими уровнями атома	94
4.3. Нерезонансные переходы $n \rightarrow n'$ при столкновениях с атомами .	95
4.4. Переходы $n \rightarrow n'$ между ридберговскими уровнями атома в столк- новениях с электронами	97
4.5. Сравнение эффективностей резонансных механизмов тушения и захвата электронов на ридберговские уровни	98
4.6. Роль резонансных и нерезонансных механизмов тушения ридбер- говских уровней атома	100
4.7. Заключительные замечания	103

Глава 5. Резонансное диссоциативное возбуждение гомоядерных и гетероядерных ионов инертных газов электронными ударом 106

5.1. Вводные замечания	106
5.2. Исходные уравнения	108
5.3. Интегральный вклад колебательно-вращательных уровней в се- чение диссоциативного возбуждения молекулярного иона	111
5.4. Квазиклассические выражения для констант скоростей диссоциации	115
5.5. Эффективный параметр взаимодействия	116
5.6. Анализ роли диссоциативного возбуждения и диссоциативной ре- комбинации	117
5.7. Результаты и обсуждение	120
5.7.1. Сечения и константы скорости диссоциативного возбуж- дения гетероядерных ионов инертных газов	120
5.7.2. Диссоциация гомоядерных ионов инертных газов	123
5.7.3. Изменение энергии электронов в процессе диссоциации мо- лекулярных ионов	128
5.8. Основные выводы	133

Глава 6. Фотодиссоциация гомоядерных ионов инертных газов и свободно-свободные радиационные переходы	136
6.1. Исходные формулы для эффективных сечений и коэффициентов фотопоглощения	136
6.2. Зависимости суммарных сечений фотодиссоциации от частоты фотона при различных температурах	141
6.3. Относительная эффективность свободно-свободных фотопереходов	143
6.4. Коэффициент поглощения света при свободно-свободных фотопе- реходах	145
6.5. Суммарный коэффициент поглощения света в результате связанно- свободных и свободно-свободных фотопереходов	146
6.6. Краткие выводы	147
Заключение	148
Список использованной литературы	154

Введение

Актуальность темы исследования

Элементарные радиационные и столкновительные процессы, происходящие с участием или образованием молекулярных и атомарных ионов, а также процессы релаксации энергии электронного возбуждения по атомным уровням, представляют огромный интерес для спектроскопии, кинетики и диагностики низкотемпературной плазмы [1, 2], физики звездных и планетных атмосфер [3, 4], физики и химии ранней Вселенной [5, 6]. Информация о наиболее эффективных физических механизмах такого рода процессов и надежные данные об их сечениях и константах скоростей необходимы для многих приложений физики плазмы, а также для выяснения основных каналов и эффективных способов формирования инверсной заселенности в активных средах газовых и плазменных лазеров. Весьма значительный интерес для решения многих фундаментальных и прикладных проблем современной оптики и спектроскопии, атомной и молекулярной физики, физики плазмы и плазмохимии представляют, в частности, резонансные процессы неадиабатического обмена энергии электронов и фотонов с молекулярными и квазимолекулярными ионами. К числу изучаемых в диссертации процессов относится фотодиссоциация, прямое диссоциативное возбуждение и диссоциативная рекомбинация молекулярных ионов, а также тройная рекомбинация электронов с ионами с образованием атомов в ридберговских состояниях, переходы между высоковозбужденными атомными уровнями $n-n'$ при столкновениях с нейтральными и заряженными частицами и свободно-свободные фотопереходы при столкновениях атомов и ионов.

Указанные процессы будут исследованы в диссертационной работе в широком диапазоне температур и степеней ионизации в плазмах смесей инертных газов, возбуждаемых электронным пучком, импульсными разрядами или в результате оптической накачки. Исследования указанных процессов в смесях инертных газов представляют значительный интерес для разработки эффек-

тивных источников ВУФ-излучения [7] и мощных газовых и плазменных лазеров [8–11]. Изучаемые процессы происходят в результате механизма неадиабатического обмена энергией между внешним и внутренними электронами системы, состоящей из электрона и молекулярного или квазимолекулярного иона, образованного в ходе столкновения атомарного иона с нейтральной частицей буферного газа. Актуальность исследования подобного рода механизмов связана с тем, что в целом ряде случаев указанные переходы вносят определяющий вклад в заселение возбужденных и высоковозбужденных состояний атомов, что имеет принципиальное значение для ряда практических приложений. В частности, известно, что диссоциативная рекомбинация гетероядерных и гомоядерных ионов инертных газов играет важную роль в формировании инверсной заселенности в активной среде мощного ксенонового лазера ИК-диапазона, функционирующего на переходе $5d \rightarrow 6p$ [12, 13]. Кроме того, согласно оценкам (см., например, [13]), заселение верхних состояний рабочих переходов происходит преимущественно не прямым способом, а в результате захватов электронов на ридберговские уровни и серии столкновительных резонансных переходов, сопровождающихся девозбуждением атома ксенона. К этому следует добавить, что по теоретическим оценкам [14, 15], резонансный механизм трехчастичного захвата электронов атомарными ионами и столкновительного тушения энергии электронного возбуждения атомов может существенно увеличивать эффективность электрон-ионной рекомбинации в плазме смесей инертных газов.

Это указывает на актуальность проведения надежных расчетов сечений и констант скоростей указанных выше процессов. При этом особое внимание должно быть уделено исследованию резонансных механизмов радиационных переходов, а также процессов захвата электронов атомарными и молекулярными ионами и неупругих переходов между уровнями атомов ввиду их определяющей роли при заселении возбужденных и высоковозбужденных состояний атомов. Построенная в работе теория и полученные на ее основе конкретные результаты создадут надежную основу для дальнейшего построения кинетики электрон-ионной рекомбинации и релаксации низкотемпературной плазмы смесей инертных газов, а также для изучения ее излучательных свойств и проведения детальной спектроскопической диагностики.

Цель диссертации и решаемые задачи

Основная цель диссертационной работы состоит в теоретическом исследовании ряда эффективных резонансных процессов, происходящих при столкновениях молекулярных и квазимолекулярных ионов с электронами и фотонами в низкотемпературной плазме инертных газов. К ним относятся процессы фотодиссоциации, диссоциативной рекомбинации и диссоциативного возбуждения сильновозбужденных связанных молекулярных ионов электронным ударом, сопровождающиеся надиабатическими переходами между их различными электронными термами. Помимо этого, к ним относятся резонансные процессы неадиабатического обмена энергии внешнего электрона с квазимолекулярными ионами, образующимися в ходе столкновения атомарных ионов с атомами буферного газа (трехчастичный захват электрона ионами и переходы между ридберговскими уровнями), а также свободно-свободные радиационные переходы при взаимодействии фотонов с квазимолекулярными ионами. В качестве конкретных объектов исследования выбраны гомоядерные и гетероядерные ионы инертных газов с сильно различающимися друг от друга значениями энергии диссоциации в диапазоне от 30 мэВ до 1 эВ.

В диссертации сформулированы и решены следующие задачи:

- Разработка самосогласованных теоретических моделей и вывод полуаналитических формул для сечений и констант скоростей резонансных механизмов диссоциативной рекомбинации электронов с сильновозбужденными молекулярными ионами и трехчастичного захвата электронов атомарными ионами при столкновениях с нейтральными частицами с образованием атомов в ридберговских состояниях.
- Сравнительный анализ эффективностей резонансных механизмов диссоциативной и трехчастичной электрон-ионной рекомбинации в условиях, типичных для низкотемпературной плазмы смесей инертных газов. Установление характера зависимостей эффективных сечений и констант скоростей указанных процессов от степени ионизации и температур электронной и ионной компонент плазмы, а также от параметров молекулярных ионов, в том числе от величины их энергии диссоциации.
- Расчет абсолютных вкладов процессов резонансного захвата электронов ионами и резонансных неупругих переходов между высоковозбужденными уровнями $n \rightarrow n'$ и установление относительной роли этих процессов в динамике за-

селения ридберговских состояний атомов инертных газов.

– Вывод аналитических выражений импульсного приближения для сечений и констант скоростей процесса захвата электронов атомарными ионами на ридберговские уровни nl при столкновениях с нейтральными частицами в результате нерезонансного механизма передачи энергии налетающего электрона в кинетическую энергию относительного движения частиц $A(nl)$ и B .

– Выяснение роли процессов резонансного захвата электронов атомарными ионами на ридберговские уровни и резонансного тушения высоковозбужденных состояний атомов путем сравнения их констант скоростей с соответствующими величинами для традиционных механизмов нерезонансного захвата и неупругого тушения энергии электронного возбуждения атомов при столкновениях со свободными электронами и нейтральными частицами плазмы.

– Построение квазиклассической модели расчета сечений и констант скоростей процесса резонансной диссоциации молекулярных ионов электронным ударом. Сравнение вкладов и выяснение доминирующей роли процессов прямой диссоциации и диссоциативной рекомбинации гомоядерных и гетероядерных ионов инертных газов в разрушении этих ионов в плазме в зависимости от их энергии диссоциации и температуры.

– Расчеты и исследование поведения эффективных сечений и коэффициентов поглощения света в процессах фотодиссоциации гомоядерных ионов инертных газов и свободно-свободных радиационных переходов при столкновениях атомов и атомарных ионов. Сравнительный анализ вкладов указанных процессов в результирующий спектр фотопоглощения в широкой области температур квазиравновесной плазмы.

– Сравнение полученных в диссертации результатов расчетов с имеющимися в литературе теоретическими и экспериментальными данными.

Научная новизна работы

Одна из наиболее важных особенностей исследуемых в работе процессов заключается в том, что они протекают в условиях эффективного теплового возбуждения огромного числа их колебательно-вращательных состояний и сопровождаются неадиабатическими переходами между различными электронными термами молекулярных и квазимолекулярных ионов. В представленной работе впервые проведено детальное исследование указанных процессов в случае сла-

босвязанных ($D_0 = 33$ мэВ для NeXe^+) и умеренносвязанных ($D_0 = 171$ и 400 мэВ для ArXe^+ и KrXe^+) гетероядерных ионов инертных газов. Надежных сведений об элементарных процессах с участием таких ионов ранее в литературе практически не было. Важным элементом научной новизны является разработанный в диссертации оригинальный теоретический подход, основанный на квазиклассической версии теории неадиабатических переходов и на приближении квазинепрерывного спектра колебательно-вращательных уровней молекулярных ионов. Благодаря данному подходу имеется возможность относительно простым полуаналитическим образом рассчитать интегральный вклад всего колебательно-вращательного квазиконтинуума молекулярного иона в динамику исследуемых резонансных процессов. Это имеет чрезвычайно важное значение, поскольку прямое решение поставленных в диссертации задач, исходя из первых принципов, связано с колоссальными вычислительными трудностями из-за необходимости учета огромного числа состояний, вовлеченных в динамику рассматриваемых неадиабатических переходов. Еще одним принципиально новым элементом диссертационной работы является исследование динамики резонансных процессов трехчастичного захвата электронов атомарными ионами в ридберговские состояния атомов при столкновениях с нейтральными атомными частицами плазмы в ходе электрон-ионной рекомбинации, а также демонстрация важной (а в ряде случаев и доминирующей) роли этого процесса в низкотемпературной плазме смесей инертных газов, содержащей слабосвязанные ионы инертных газов. Таким образом, в случае слабосвязанных молекулярных ионов в работе впервые установлена ключевая роль состояний непрерывного спектра относительного движения их ядер в динамике релаксации и электрон-ионной рекомбинации в плазме смесей инертных газов. Научно-значимыми для оптики и спектроскопии плазмы инертных газов являются также полученные в диссертации результаты расчета эффективных сечений и интегрального вклада всего колебательно-вращательного квазиконтинуума в полный коэффициент непрерывного поглощения света гомоядерными ионами, обусловленный связанно-свободными и свободно свободными фотопереходами.

Научная и практическая ценность работы

Полученная в диссертационной работе новая информация о физических механизмах и количественные данные о динамических характеристиках исследу-

емых резонансных процессов неадиабатического обмена энергии электронов и фотонов с молекулярными ионами существенно расширяют устоявшиеся представления о роли этих процессов в спектроскопии и кинетике электрон-ионной рекомбинации и релаксации энергии электронного возбуждения в низкотемпературной плазме смесей инертных газов. Благодаря этим данным появляются возможности для дальнейшей модификации уже имеющихся и для разработки принципиально новых кинетических моделей радиационно-столкновительных процессов в такого рода неравновесной плазме, применяемой во многих практических приложениях. К ним, в частности, относятся широко проводимые исследования и разработки в области мощных газовых лазеров и эффективных источников излучения ВУФ-диапазона. Сведения об эффективности резонансных процессов фотодиссоциации, диссоциативной рекомбинации и диссоциативного возбуждения молекулярных ионов аргона электронным ударом важны, например, при разработке лазеров с оптической накачкой на инертных газах. В свою очередь, данные о сечениях и константах скоростей процессов резонансного захвата электронов ионами на фиксированные ридберговские уровни и переходов между ними необходимы при исследовании каналов образования инверсной заселенности на переходах $5d - 6p$ атома ксенона в работах по созданию мощных инфракрасных лазеров на смесях Ar/Xe . В этом контексте значимость для спектроскопии и кинетики плазмы, а также для приложений к лазерной физике представляет проведенный в работе сравнительный анализ эффективностей процессов диссоциативной рекомбинации и прямой диссоциации гомоядерных, Xe_2^+ , и гетероядерных ионов, $ArXe^+$, электронным ударом. Полученные в диссертации результаты необходимы также для приложений к кинетике и спектроскопии плазмы послесвечения импульсных газовых разрядов и плазмы смесей инертных газов, возбуждаемых электронным пучком или в результате оптической накачки.

Достоверность полученных результатов

Для расчетов сечений и констант скоростей изучаемых в работе резонансных и нерезонансных процессов в плазме в диссертации был использован ряд самосогласованных теоретических подходов и современных методов спектроскопии и атомно-молекулярной физики, доказавших свою эффективность и надежность в применениях к решениям многих физических проблем. При реали-

зации развитых в работе теоретических методов и численных алгоритмов были использованы современные надежные данные по кривым потенциальной энергии и спектроскопическим параметрам гомоядерных и гетероядерных ионов инертных газов. При исследовании резонансных механизмов диссоциативного и трехчастичного захвата на ридберговские уровни были использованы надежные современные данные по энергетической структуре электронных уровней ридберговских атомов инертных газов. Достоверность полученных результатов расчета непосредственно подтверждена хорошим качественным и количественным совпадением с имеющимися в литературе экспериментальными и теоретическими данными.

Положения, выносимые на защиту

1. При резонансном захвате электронов на ридберговские уровни атомов в плазме смесей инертных газов, содержащей атомарные и молекулярные ионы, тройная рекомбинация в столкновениях электронов с атомарными ионами, A^+ , и атомами, B , буферного газа доминирует в гетероядерных системах $BA^+ + e$ с малой энергией диссоциации, D_0 , иона BA^+ ($D_0 \lesssim 10-50$ meV), а диссоциативная рекомбинация молекулярных ионов, BA^+ , с электронами – в системах с большими и промежуточными значениями $D_0 \gtrsim 0.1 - 1$ eV.
2. В процессах тройной электрон-ионной рекомбинации и заселения низколежащих ридберговских уровней атомов Xe в плазмах смесей инертных газов Rg/Xe ($[Xe] \ll [Rg]$, $Rg = Ar, Kr$) резонансные механизмы захвата электронов ионами преобладают над нерезонансными в столкновениях с атомами буферного газа и с электронами в широкой области температур и степеней ионизации плазмы κ . Эффекты резкого возрастания скорости рекомбинации проявляются при этом вплоть до значений $\kappa \lesssim 10^{-5}$, а при более высоких κ доминируют столкновения с электронами.
3. Вклад процесса резонансного диссоциативного возбуждения в полную скорость разрушения молекулярных ионов инертных газов электронным ударом существенно возрастает по мере увеличения температуры T_e и сильно зависит от значения энергии диссоциации D_0 . Для слабосвязанных гетероядерных ионов с энергией $D_0 < 100$ мэВ ($HeXe^+$ и $NeXe^+$) этот про-

цесс доминирует над альтернативным каналом резонансного распада ионов (диссоциативной рекомбинацией) практически во всей области температур электронов, в том числе и при $T_e \sim 300$ К.

4. В процессах столкновения гомоядерных ионов инертных газов, Rg_2^+ , с электронами в зависимости от температуры T_e реализуются три различных канала их разрушения: (i) диссоциативная рекомбинация с заселением низких электронных уровней атомов, (ii) диссоциативная рекомбинация с заселением ридберговских уровней, (iii) прямое диссоциативное возбуждение молекулярного иона. При низких T_e доминирует канал (i) разрушения иона; с увеличением $T_e \gtrsim 5000$ К сначала проявляется канал (ii), а при дальнейшем росте $T_e \gtrsim 10000$ К включается канал (iii), который становится доминирующим при $T_e \gtrsim 40000$ К.
5. В процессе фотодиссоциации гомоядерных ионов инертных газов, Rg_2^+ , при достаточно низких температурах $T \lesssim 1000$ К у коэффициентов поглощения света наблюдается явно выраженный максимум в области энергий квантов $\hbar\omega \gtrsim 1$ эВ. Его положение определяется величиной расщепления электронных термов иона, между которыми происходят неадиабатические переходы. При увеличении температуры максимум становится более высоким, а его положение смещается в сторону более низких энергий $\hbar\omega$.
6. При высоких температурах наряду с фотодиссоциацией гомоядерных ионов инертных газов существенную роль в процессе фотопоглощения играют свободно–свободные радиационные переходы между различными электронными термами квазимолекулярного иона, Rg_2^+ . Их вклад становится сопоставимым с вкладом фотодиссоциации при $T \gtrsim 3000 - 5000$ К.

Личный вклад автора диссертации

Личный вклад автора диссертации состоит в проведении всех численных расчётов, в подборе и анализе литературы по теме диссертации, в активном участии в обсуждении постановки задач, в совместном с соавторами анализе полученных результатов и написании статей, в формулировке основных выводов диссертации.

Апробация работы

Материалы работы опубликованы в 8 статьях в рецензируемых журналах, индексируемых базами Web of Science и Scopus. Кроме того, ключевые результаты диссертации были отражены в 11 докладах, представленных на российских и международных конференциях: «Импульсная Сильноточная Вакуумная и Полупроводниковая Электроника» ИСВПЭ-2017 (19-20 октября 2017, ФИАН); 60-я Всероссийская научная конференция МФТИ, ФИАН, 23 ноября 2017; The Fifth MIPT-UEC-LPI International Workshop on Atomic, Molecular and Optical Physics; XXXI International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions Deauville, France, July 23-30, 2019; Школа молодых ученых «Быстропротекающие электровзрывные, электронные и электромагнитные процессы в импульсной электронике и оптоэлектронике» БПИО-2019, 12-14 ноября, ФИАН; 62-я Всероссийская научная конференция МФТИ, ФИАН, 18 ноября 2019. Список публикаций автора по теме диссертации представлен на с. 151–153.

Структура и объем диссертации

Диссертация включает в себя Введение, шесть глав основного текста, заключение и список литературы. Объем диссертации составляет 172 страницы текста, в том числе 31 рисунок, 188 наименований в списке литературы.

Глава 1. Обзор современного состояния исследований

1.1. Классификация рассматриваемых в диссертации радиационных и столкновительных процессов

В этом разделе будут кратко обсуждаться основные механизмы рассматриваемых в диссертации столкновительных процессов, происходящих с участием или образованием атомов в ридберговских состояниях. Наиболее широко обсуждаемые в литературе процессы тройной электрон-ионной рекомбинации происходят в результате нерезонансного механизма переходов, при котором рекомбинирующий электрон передает свою энергию непосредственно в энергию относительного движения двух других сталкивающихся частиц. К такому механизму относится, в первую очередь, традиционный нерезонансный процесс трехчастичного захвата электронов атомарными ионами при столкновениях со свободными электронами плазмы, а также индуцированные столкновениями с электронами неупругие переходы $n \rightarrow n'$ между высоковозбужденными уровнями:



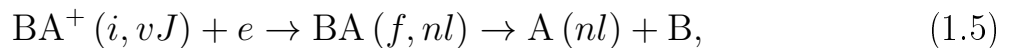
Указанные процессы, ввиду дальнего действия кулоновского взаимодействия, играют ключевую роль в заселении ридберговских состояний атома при достаточно высоких степенях ионизации плазмы. В противоположность этому, в плотной слабоионизованной плазме заселение высоковозбужденных состояний происходит в результате нерезонансного захвата электронов ионами в высоковозбужденные состояния атомов и релаксации энергии электронного возбуждения по атомным уровням при столкновениях с нейтральными атомными

частицами:

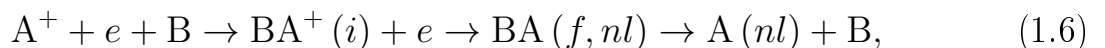


Нерезонансные связанно-связанные и свободно-связанные процессы (1.1–1.4), обусловленные столкновениями с электронами, достаточно подробно изучены (см., например, книгу [16] и приведенные в ней ссылки). Исключение здесь составляет относительно слабоизученный нерезонансный процесс (1.3) трехчастичного захвата электронов ионами при столкновениях с нейтральными атомами буферного газа В. В работе [17], однако, был изучен обратный механизм ионизации ридберговского атома при столкновениях с нейтральной частицей. В Главе 2 диссертации будут аналитическим методом выведены формулы для расчета сечений и констант скорости нерезонансного процесса (1.3) с использованием соотношения детального баланса и исходного выражения для сечения процесса прямой ионизации атома при столкновении с нейтральным атомом, полученного в работе [17] в рамках модели квазисвободного электрона и импульсного приближения.

Как будет показано в диссертации, в плазме смесей инертных газов, содержащей атомарные и молекулярные ионы, основную роль в образовании атомов в ридберговских состояниях могут играть процессы, происходящие в результате резонансного неадиабатического обмена энергии между внешним электроном и внутренними электронами молекулярного (или квазимолекулярного) иона BA^+ . Указанные процессы, в противоположность процессам (1.1)–(1.4), будут далее именоваться резонансными. К ним относятся процесс диссоциативного захвата электронов:

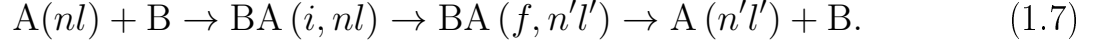


и резонансный захват электронов атомарными ионами в тройных столкновениях с атомами буферного газа:



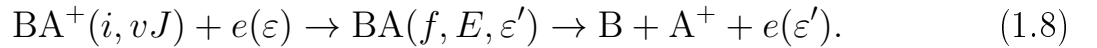
учтенный недавно в кинетической модели [15] наряду с другими рекомбинационными и релаксационными процессами при оценке результирующего коэффициента рекомбинации такой плазмы. Здесь n и l – главное и орбитальное квантовые числа ридберговского атома $A(nl)$, v и J – колебательное и вращательное квантовые числа иона BA^+ в начальном электронном состоянии i .

Еще одним процессом, оказывающим существенное влияние на динамику заселения ридберговских уровней атомов инертных газов, является резонансный механизм связанно-связанных переходов $n \rightarrow n'$ при столкновениях с нейтральными частицами буферного газа В:



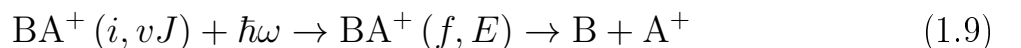
Отличие данного механизма от близкого ему резонансного механизма трехчастичного захвата (1.6) состоит в том, что электрон в начальном канале реакции находится в связанном состоянии.

Помимо различных механизмов захвата электронов ионами на ридберговские уровни атомов, широкий исследовательский интерес представляют также резонансные механизмы разрушения молекулярных ионов. Среди них можно выделить резонансный процесс диссоциативного возбуждения (здесь и далее — ДВ) молекулярного иона электронным ударом. По своей природе этот процесс является близким к резонансному процессу диссоциативной рекомбинации (1.5). Однако он отличается от диссоциативной рекомбинации тем, что в процессе ДВ электрон в конечном канале реакции остается в состоянии непрерывного спектра:



Здесь ε и ε' — начальная и конечная энергии электронов, vJ — начальное колебательно-вращательное состояние ионов BA^+ , а E — конечная энергия относительного движения ядер. При резонансном процессе (1.8) диссоциация происходит в результате обмена энергии внешнего электрона и внутренних электронов оболочки иона BA^+ . Существенно, что реакция (1.8) сопровождается резонансным неадиабатическим переходом между различными электронными термами $U_i(R)$ и $U_f(R)$ молекулярного (квазимолекулярного) иона BA^+ .

Диссоциация молекулярных ионов может также происходить в результате процессов резонансного обмена энергии фотонов с (квази-)молекулярными ионами. Примером этого является в первую очередь процесс фотодиссоциации



молекулярных ионов инертных газов, приводящий к непрерывному поглощению света. Другой пример — это неадиабатические радиационные свободно-свободные переходы



возникающие при столкновениях атомарных ионов с атомами буферного (или собственного) газа. Основное отличие процесса фотодиссоциации (1.9) от близкого процесса (1.10) состоит в том, что в первом случае ион VA^+ находится в связанном состоянии, а во втором – ядра частиц V и A^+ находятся в состоянии непрерывного спектра. Неадиабатические процессы (1.8–1.10) рассмотрены в Главах 5 и 6 диссертации.

1.2. Фотодиссоциация молекулярного иона

Значительное количество актуальных работ посвящено исследованию процессов, происходящих при взаимодействии молекулярных катионов благородных газов с электромагнитным излучением (см., например, [18–20]). Наряду с традиционно исследуемыми процессами фотопоглощения на переходах между связанными состояниями иона, существенное внимание в литературе уделяется экспериментальному [19–21] и теоретическому [22–24] рассмотрению реакции фотодиссоциации, происходящей либо в результате прямой передачи энергии фотона ядерной подсистеме, либо вследствие перехода электронной оболочки из начального связанного состояния $U_i(R)$ на отталкивательный терм $U_f(R)$ (процесс (1.9)).

Основные принципы классической и полуклассической теории процессов фотодиссоциации (1.9), протекающих в результате резонансных неадиабатических переходов между термами молекулярных ионов, были сформулированы в работах Крамерса и Тер-Хаара [25], Яблонского [26] и Бейтса [27]. В свою очередь, в работе [28] был впервые рассмотрен вопрос об установлении относительной роли резонансных свободно-свободных фотопереходов (1.10) для ряда звездных атмосфер. Отметим, что большинство теоретических работ об исследовании фотопроцессов (1.9–1.10) посвящено рассмотрению молекулярного иона H_2^+ , поскольку он представляет наиболее простую возможную двухатомную молекулу.

Теория радиационных неадиабатических переходов ${}^2\Sigma_g^+ \rightarrow {}^2\Sigma_u^+$ между термами молекулярного иона H_2^+ получила существенный толчок в развитии в серии работ научной группы Бейтса [29–31]. В частности, в работах [29, 31] были рассчитаны энергии расщепления термов $\Delta U_{fi}(R)$ и силы осцилляторов радиационного электронного перехода между термами ${}^2\Sigma_g^+ \rightarrow {}^2\Sigma_u^+$, а в работе [30] проведены вычисления интегрального коэффициента поглощения света $K_T(\omega)$ за счет процессов (1.9–1.10) в широком диапазоне газовых температур T от

2500 К до 12000 К. Предложенная Бейтсом модель не позволяла проводить расчеты сечений фотодиссоциации для отдельных колебательно-вращательных состояний vJ , но давала простое аналитическое выражение для интегрального вклада всех состояний, полученное с использованием классической функции распределения межъядерного расстояния R в двухатомной системе с заданным потенциалом взаимодействия $U(R)$. Расчеты, проведенные в работе Бейтса [30], послужили основой для широкого набора табличных данных и аппроксимационных формул для коэффициентов поглощения света в результате процессов (1.9–1.10) для случая иона H_2^+ (см. [32, 33]).

В работах [34, 35] были осуществлены квантовомеханические расчеты сечений фотодиссоциации (1.9) с отдельно взятых колебательных состояний v и малых вращательных чисел $J = 0$ и 1 . Дальнейшие квантовомеханические расчеты сечений для отдельно взятых колебательно-вращательных состояний vJ иона H_2^+ были выполнены в работе [36] для случаев вращательных квантовых чисел $0 \leq J \leq 8$. На основе полученных результатов были проведены вычисления больцмановски усредненных сечений в широком диапазоне газовых температур T от 2500 до 26000 К и длин волн внешнего излучения $50 \leq \lambda$ (нм) ≤ 2500 . Расчеты парциальных сечений $\sigma_{vJ}(\lambda)$ с дальнейшим усреднением по огромному числу колебательно-вращательных состояний также проводились в работе [37]. Полученные там результаты позволили значительно расширить представления о зависимости сечений фотодиссоциации (1.9) от длины световой волны λ излучения и газовой температуры T .

Широкий ряд работ посвящен исследованию резонансных радиационных процессов (1.9–1.10) в контексте задач астрофизики. В частности, в работах [38–40] был осуществлен сравнительный анализ вклада механизмов фотодиссоциации (1.9) молекулярного иона H_2^+ и радиационных переходов (1.10) в фотопоглощение атмосферы солнца. Помимо этого, в работах [41, 42] были проведены обширные исследования резонансных неадиабатических процессов фотопоглощения ионами H_2^+ для широкого диапазона длин волн и температур газа T , характерных для звездных атмосфер. Важная особенность теоретического подхода, развитого и реализованного в [40–42], состоит в том, что он дает относительно простое полу-аналитическое выражение для сечений и коэффициентов радиационных механизмов (1.9–1.10) в условиях сильного возбуждения большого числа колебательных и вращательных уровней основного электронного состояния $U_i(R)$.

Обобщая сказанное выше, отметим, что на данный момент получены обширные экспериментальные данные, а также развито большое число теоретических подходов для исследования процессов фотодиссоциации различных молекул и свободно-свободных радиационных переходов. В частности, в работе [43] представлен общий подход для расчета сечений и коэффициентов фотодиссоциации молекул, представляющих интерес для задач астрофизики. Отметим, однако, что детальные квантовомеханические расчеты коэффициентов фотодиссоциации молекулярных ионов, учитывающие вклад большого числа колебательно-вращательных состояний vJ , реализованы лишь для ограниченного числа простейших двухатомных систем (таких как H_2^+ и He_2^+).

1.3. Связанно-связанные и свободно-связанные переходы электрона в процессах с участием и образованием ридберговских атомов

1.3.1. Основные свойства ридберговских атомов

В данной работе значительное внимание уделено исследованию столкновительных процессов, сопровождающихся образованием ридберговских атомов. Ридберговские атомы — это атомы, у которых один из электронов находится в высоковозбужденном состоянии с большим значением главного квантового числа $n \gg 1$. За счет этого ридберговские атомы обладают целым рядом уникальных физических свойств (см. [16, 44]). Перечислим наиболее существенные свойства водородоподобных ридберговских атомов с зарядом ядра Z :

- Большие радиусы орбиты высоковозбужденного электрона $r_n \sim n^2 a_0 / Z$, где $a_0 = \hbar^2 / (m_e e^2) = 0.53 \cdot 10^{-8}$ см — атомная единица длины. Из-за большого расстояния от ядра до внешнего электрона действующее на него поле является преимущественно кулоновским, так что основные свойства ридберговских атомов близки к свойствам водорода. Ввиду больших размеров ридберговских атомов у них наблюдаются крайне высокие значения сечений столкновения с нейтральными и заряженными частицами. Благодаря большим размерам орбит внешнего электрона можно воспользоваться одноэлектронным приближением при рассмотрении взаимодействия электрона с квазимолекулярными ионами VA^+ .
- Высокие значения периода обращения внешнего электрона по орбите $T_n \sim$

$2\pi(a_0/v_0)n^3/Z^2$, и, соответственно, низкие скорости орбитального движения $v_n \sim Zv_0/n$. Здесь $v_0 = e^2/\hbar = 2.19 \cdot 10^8$ см/с — атомная единица скорости. При этом величины T_n и v_n почти не зависят от орбитального квантового числа l , определяющего форму классической орбиты электрона.

- Низкий потенциал ионизации внешнего электрона, быстро убывающий с ростом n : $I_n = |E_n| = Z^2 Ry/n^2$, где $Ry = me^4/(2\hbar^2) = 13.606$ эВ — постоянная Ридберга. Наряду с высокими значениями электрической поляризуемости и магнитной восприимчивости, это делает ридберговские атомы крайне чувствительными к внешнему возмущению.
- Частота переходов между соседними ридберговскими уровнями быстро убывает с ростом n : $\omega_{n,n+1} \approx 2Z^2 Ry/n^3$. При этом плотность ридберговских состояний на единичный интервал энергии, напротив, быстро растет по мере увеличения главного квантового числа n : $\rho(E_n) = g_{\text{tot}}|dn/dE_n| = n^5 Z^2/Ry \sim |E_n|^{-5/2}$, где $g_{\text{tot}} = 2n^2$. Данные свойства ридберговских атомов представляют большую важность для исследования кинетики столкновительных и релаксационных процессов, поскольку позволяют применять для описания высоковозбужденных состояний атома приближение квази-непрерывного спектра.
- Радиационное время жизни ридберговских состояний атомов с квантовыми числами n, l быстро растет с ростом n : $\tau_n \sim n^3$ при $l \ll n$ и $\tau_n \sim n^5$ при $l \approx n$.

Элементарные процессы с участием ридберговских состояний атомов наиболее интенсивно исследовались ранее на примерах атомов водорода и атомов щелочных металлов. Имеется также ряд экспериментальных и теоретических по процессам с участием ридберговских атомов инертных газов. Для процессов с участием высоковозбужденных атомов щелочных металлов с одним электроном сверх заполненной электронной оболочки во многих случаях их теоретическое описание может быть приближенно дано на основе подходов, первоначально разработанных для водородоподобных атомов. При этом вместо главного квантового числа n следует использовать его эффективное значение $n_* = n - \delta_l$, где δ_l — квантовый дефект, который почти не зависит от n , но быстро падает с ростом орбитального момента l , так что $\delta_l \approx 0$ при $l \geq 3$. При рассмотре-

нии высоковозбуждённых атомов инертных газов наблюдается гораздо более сложная структура энергетического спектра. Однако и она может быть приближенно описана с использованием метода квантового дефекта, причем при $l \geq 3$ ридберговские nl -состояния даже тяжелых атомов инертных газов становятся практически водородоподобными. Величины квантовых дефектов могут быть рассчитаны с использованием сложных квантовомеханических подходов, однако чаще используются эмпирические значения, полученные из данных по спектрам.

Характерные значения главного квантового числа n , наблюдаемые в лабораторных условиях и в космическом пространстве, варьируются в очень широком диапазоне. Обычно в опытах с разреженными газовыми ячейками и атомными пучками наблюдаются ридберговские атомы с $n \sim 10 - 100$. В то же время, в ряде работ (см., например, [45, 46]) показана возможность получения ридберговских состояний с $n \sim 500 - 1000$. В межзвездной среде наблюдались значения главных квантовых чисел ридберговских атомов $n \sim 800$ [47, 48] и выше более 1000, хотя типичные значения составляют $n \sim 100 - 300$. В данной диссертационной работе, сориентированной в основном на дальнейшие приложения к кинетике и спектроскопии плазмы, при изучении указанных выше неадиабатических процессов обмена энергии молекулярных и квазимолекулярных ионов с электронами расчеты и теоретический анализ будут преимущественно проводиться для состояний атомов со значениями главного квантового числа $n \sim 10 - 100$.

1.3.2. Переходы между ридберговскими уровнями

Исследования различных механизмов связанно-связанных переходов между ридберговскими уровнями (1.2, 1.4, 1.7) важны для ряда задач атомной спектроскопии и кинетики релаксации низкотемпературной плазмы. Традиционные механизмы (1.2, 1.4) переходов $nl \rightarrow n'l'$ (также известные, как n, l -перемешивание), протекающие в результате столкновений со свободными электронами или нейтральными частицами, изучены достаточно подробно (см., [49–53], а также обзор [54] и ссылки в нем). Они, однако, рассматриваются в Главе 4 при сравнительном анализе различных каналов связанно-связанных переходов между ридберговскими уровнями. Там же приведены формулы, применяемые в этой работе для расчета динамических характеристик (сечений и констант скоростей) указанных процессов (1.2, 1.4). В основе подходов, используемых для анализа данных процессов, лежит предположение, что влиянием атомно-

го ядра на процессы столкновения летающей частицы с высоковозбужденным электроном можно пренебречь. Таким образом, рассмотрение сводится к задаче взаимодействия двух частиц: налетающей частицы с заданной энергией и ридберговского электрона с распределением скоростей, как в классическом атоме. Использование подобного приближения становится возможным благодаря указанным в предыдущем разделе уникальным свойствам ридберговских состояний.

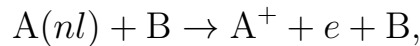
В контексте различных задач атомной спектроскопии и кинетики релаксации низкотемпературной плазмы значительное число работ посвящено изучению неупругих неадиабатических переходов (1.7) между ридберговскими уровнями $n \rightarrow n'$, сопровождаемых резонансной передачей энергии $\Delta\varepsilon_{nn'}$ внешнему электрону от электронной подсистемы гомоядерного [55–57] или гетероядерного [14] квазимолекулярного иона. Большой интерес к этому процессу обусловлен тем, что его эффективность оказывается в широкой области значений n значительно выше, чем в случае альтернативного механизма (1.4) рассеяния квазисвободного электрона на возмущающей нейтральной частице. В этом состоит принципиальное отличие указанных неупругих резонансных процессов тепловых столкновений ридберговских атомов с невозбужденными атомными частицами от изученных ранее традиционных процессов n, l -перемешивания (1.2, 1.4) с относительно небольшими значениями переданной внешнему электрону энергии [49–52] (подробнее см. [54]).

Ввиду высокой эффективности резонансных процессов тушения (1.7) в широкой области уровней n , целый ряд теоретических исследований посвящен установлению роли этих механизмов в кинетике рекомбинации плазмы. Возможность сильного увеличения скорости рекомбинации электронов с атомарными ионами в результате эффективных резонансных связанно-связанных переходов $n \rightarrow n'$ была теоретически и экспериментально продемонстрирована в работе [14]. В недавней статье [15] были сделаны предварительные оценки, указывающие на возможность резкого увеличения скорости рекомбинационного заселения относительно невысоких ридберговских уровней и роста результирующего коэффициента рекомбинации благодаря вкладу резонансных свободно-связанных переходов электрона (1.7), сопровождаемых переходами между различными электронными термами квазимолекулярного иона.

Значительный интерес представляет изучение резонансных связанно-связанных переходов (1.7) в контексте задач динамики и кинетики астрофизической плаз-

мы. Так, в работах [55–57] был проведен сравнительный анализ эффективности процессов (1.7) и (1.2) при температурах и степенях ионизации водородной плазмы, характерных для фотосферы Солнца. Соответствующие значения параметров плазмы были взяты из известной кинетической модели фотосферы [58]. Из результатов, полученных в работах [55–57, 59], следует, что резонансный механизм переходов $n \rightarrow n - \Delta n$ значительно превосходит аналогичный механизм (1.2) переходов при столкновениях с электронами для $n \leq 7$. Основным выводом из данных работ состоит в том, что при моделировании слабо ионизованной плазмы фотосферы солнца и интерпретации экспериментальных результатов принципиально важно учитывать влияние резонансного канала (1.7) неупругих переходов. Аналогичные исследования были проведены в работах [59–61] при рассмотрении гелиевой плазмы в условиях, характерных для атмосферы белых карликов. Теоретическое сравнение резонансного (1.7) и традиционного (1.2) механизмов n -перемешивания показало, что резонансный канал вносит доминирующий вклад в переходы с участием уровней $\text{He}(n < 7)$ и потому должен быть включен в радиационно–столкновительные модели насыщенных гелием белых карликов.

При рассмотрении нерезонансных механизмов проведенные в диссертации расчеты эффективных сечений переходов между уровнями (1.4), а также процессов захвата электронов из непрерывного спектра в ридберговские состояния (1.3), основаны на импульсном приближении (см., например, [54]). В этом случае в выкладках можно исходить из формулы для сечения процесса прямой ионизации



связывающей дифференциальное сечение этого процесса с амплитудой упругого рассеяния электрона на возмущающем атоме. Формула выглядит следующим образом:

$$\frac{d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{\text{di}}(E')}{d\varepsilon} = \frac{\mu^2 q'}{\mu_{eB}^2 q (2l + 1)} \sum_m \int d\Omega_{\mathbf{q}'\mathbf{q}} \int d\boldsymbol{\kappa} |G_{nlm}(\boldsymbol{\kappa})|^2 |f_{eB}(\boldsymbol{\kappa}, \mathbf{Q})|^2 \quad (1.11) \\ \times \delta \left[\hbar^2 ((\boldsymbol{\kappa}')^2 - \boldsymbol{\kappa}^2) / 2\mu_{eA^+} + \varepsilon_{nl} - \varepsilon \right].$$

Здесь f_{eB} – амплитуда рассеяния ультрамедленного электрона на атоме B; $\hbar\boldsymbol{\kappa}$ и $\hbar\boldsymbol{\kappa}'$ – импульс электрона в начальном и конечном канале реакции; $G_{nlm}(\boldsymbol{\kappa})$ – импульсная волновая функция электрона в состоянии nlm ; $\hbar\mathbf{q}$ и $\hbar\mathbf{q}'$ – начальный и конечный импульс относительного движения тяжелых частиц A и

В, а $\hbar\mathbf{Q} = \hbar\mathbf{q} - \hbar\mathbf{q}'$ — переданный импульс. Величины μ , μ_{eB} и μ_{eA^+} есть приведенные массы для пар частиц (А, В), (e, В) и (e, A^+), соответственно. $\varepsilon_{nl} = -Ry/(n - \delta_l)^2 < 0$ — это энергия ридберговского электрона в начальном связанном состоянии, а $\varepsilon = \hbar^2 k^2/2m$ — кинетическая энергия свободного электрона в конечном канале реакции.

Формула для сечения неупругого перехода между ридберговскими уровнями получается из формулы (1.12) для сечения ионизации с помощью соотношения

$$\frac{d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{\text{di}}(E')}{d\varepsilon} \rightarrow \sigma_{nl \rightarrow n'}^{\text{di}} \left| \frac{d\varepsilon_{n'}}{dn'} \right|^{-1} = \sigma_{nl \rightarrow n'}^{\text{di}} \frac{(n')^3}{2Ry}, \quad \varepsilon \rightarrow \varepsilon_{n'}. \quad (1.12)$$

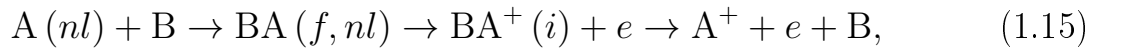
Исходное выражение для сечения нерезонансного трехчастичного захвата (1.3) получается с помощью формулы (1.12) и соотношения детального баланса, связывающего сечения двух взаимно обратных процессов:

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{cap}}(E) = 2\pi^2 \hbar (2l + 1) \frac{(q')^2}{q^2 k^2} \frac{d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{\text{di}}(E')}{d\varepsilon}. \quad (1.13)$$

$$E' = E + \varepsilon + |\varepsilon_{nl}|. \quad (1.14)$$

Здесь $E = \hbar^2 q^2/2\mu$ и $E' = \hbar^2 (q')^2/2\mu$ — кинетические энергии относительного движения частиц A^+ и В в начальном и конечном каналах реакции (1.3). Вывод результирующих формул для сечения и константы скорости процесса (1.3) приведен в Главе 2 диссертации.

При рассмотрении резонансного механизма захвата электрона ионом и неупругих переходов между ридберговскими уровнями в диссертации используются формулы, основанные на теории неадиабатических переходов между различными электронными термами квазимолекулы. В этом случае в качестве базового выражения может быть выбрано выражение для сечения резонансной прямой ионизации



где f и i обозначают верхний и нижний термы квазимолекулярного иона BA^+ , соответственно. Сечение процесса (1.15) можно выразить через матричные элементы оператора взаимодействия внешнего электрона с внутренними электронами квазимолекулярного иона BA^+ . Соответствующие формулы для сечений

прямой ионизации выглядят следующим образом (формула (11) из [62]):

$$\frac{d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{\text{dir}}(E')}{d\varepsilon} = \frac{4\pi^3 g_i}{g_f (2l+1)(q')^2} \sum_J (2J+1) \times \sum_{l'm', m} \left| \left\langle \chi_{EJ}^{(i)}(R) \left| \mathbf{V}_{i, \varepsilon l' m'}^{f, nlm}(R) \right| \chi_{E'J}^{(f)}(R) \right\rangle \right|^2. \quad (1.16)$$

Здесь E' – кинетическая энергия сталкивающихся частиц A^+ и B в конечном канале реакции (3.2), $E = \hbar^2 q^2 / 2\mu$; $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ – энергия свободного электрона; $\varepsilon_{nl} = -Ry / (n - \delta_l)^2$ – энергия ридберговского электрона, δ_l – квантовый дефект атомного уровня nl . Величина g_f / g_i есть отношение статистических весов состояний иона BA^+ , соответствующих термам f и i . Фигурирующий в формуле (1.16) электронный матричный элемент свободно-связанного неадиабатического перехода имеет вид

$$\mathbf{V}_{i, \varepsilon l' m'}^{f, nlm}(R) = \langle \psi_{\varepsilon l' m'} | \langle \phi_i | \mathbf{V}(\mathbf{r}_\kappa, \mathbf{R}) | \phi_f \rangle | \psi_{nlm} \rangle,$$

где \mathbf{V} – оператор потенциальной энергии взаимодействия электрона с молекулярным ионом, $\phi_i(\mathbf{r}_\kappa, \mathbf{R})$ и $\phi_f(\mathbf{r}_\kappa, \mathbf{R})$ – электронные волновые функции молекулярного иона, соответствующие нижнему и верхнему термам. $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ – волновая функция ридберговского электрона, $\psi_{\varepsilon l' m'}(\mathbf{r}) = \mathcal{R}_{\varepsilon l'}(r) Y_{l' m'}(\mathbf{n}_r)$, а $\mathcal{R}_{\varepsilon l'}(r)$ нормирована на $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$.

Формулы для сечений резонансных неупругих переходов (1.4) получаются с помощью выражения (1.16) и соотношения (1.12). В свою очередь, формула для сечения резонансного трехчастичного захвата (1.6) может быть получена из выражения (1.16) с помощью соотношения детального баланса (1.13) для двух взаимно обратных процессов. Соответствующие выкладки приведены в Главе 3 диссертации.

1.3.3. Захват электронов атомарными ионами на высоковозбужденные уровни в тройных столкновениях с нейтральными и заряженными частицами

Традиционные нерезонансные механизмы захвата при тройных столкновениях с участием свободных электронов (1.1) [63–66] или нейтральных частиц (1.3) [67–69] подробно изучены (см., например, книгу [16] и ссылки в ней). Однако, данные процессы рассматриваются в Главе 3 при сравнительном анализе различных каналов заселения ридберговских уровней. В рамках данного дис-

сертационного исследования был разработан теоретический подход, позволяющий получить простые аналитические выражения для сечений и констант скоростей нерезонансного захвата (1.3) при тройных столкновениях с нейтральными частицами. Указанный подход будет представлен в Главе 2 диссертации. Здесь же мы приведем для примера выражения, используемые в данной работе для расчета сечений и констант скоростей механизма (1.1). Для оценки константы скорости β_n^{ee} можно использовать формулу:

$$\beta_n^{ee} = 2^6 \pi^2 v_0 a_0^5 n^8 x_n^3 e^{x_n} \left[\frac{e^{-x_n}}{x_n} - E_1(x_n) \right] \longrightarrow \begin{cases} \propto n^4/T_e^2, & x_n \sim 1, \\ \propto n^6/T_e, & x_n \gg 1, \end{cases} \quad (1.17)$$

полученную на основе классического подхода Томсона (см. (6.88) в [70]). Здесь $x_n = Ry/(n^2 k_B T_e)$, $E_1(x) = \int_x^\infty e^{-t} dt/t$. Ее применимость ограничена областью $n \gtrsim 15$. Более точное выражение для сечения трехчастичного захвата электрона, $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{ee}$ [$\text{см}^4 \cdot \text{с}^{-1}$], может быть получено с помощью формулы (1.13) для соотношения детального баланса, в которой энергии $E = \hbar^2 q^2/2\mu$ и $E' = \hbar^2 (q')^2/2\mu$ заменены на величины ε_e и ε'_e – начальную и конечную энергию второго электрона в реакции (1.1). Соотношение детального баланса применяется к выражению [53] для дифференциального сечения обратного процесса ионизации атома электронным ударом:

$$\frac{d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}(\varepsilon'_e)}{d\varepsilon} = \frac{\pi e^4}{\varepsilon'_e + 3|\varepsilon_{nl}|} \left[\frac{1}{(\varepsilon + |\varepsilon_{nl}|)^2} + \frac{4}{3} \frac{|\varepsilon_{nl}|}{(\varepsilon + |\varepsilon_{nl}|)^3} \right], \quad (1.18)$$

где ε – начальная энергия рекомбинирующего электрона, e – заряд электрона.

Константа скорости, β_n^{ee} , захвата электронов ионами в тройных столкновениях со свободными электронами рассчитывается далее по формуле $\beta_n^{ee}(T_e) = \sum_{l=0}^{n-1} \langle v_\varepsilon \langle v_{\varepsilon_e} \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{ee}(\varepsilon_e) \rangle_{T_e} \rangle_{T_e}$. Выражение (1.18) получено в работе [53] с помощью упомянутого в предыдущем разделе подхода, согласно которому задача об ионизации ридберговского атома сводится к задаче взаимодействия двух частиц: налетающей частицы с заданной энергией и ридберговского электрона с распределением скоростей, как в классическом атоме.

Резонансный механизм трехчастичного захвата (1.6), как и механизм диссоциативной рекомбинации (1.5), протекает в результате неадиабатического обмена энергии между внешним электроном и внутренними электронами квазимолекулярного иона BA^+ . Отличие двух этих процессов состоит в том, что в случае трехчастичного процесса (1.6) квазимолекулярный ион в начальном канале реакции находится в состоянии непрерывного спектра. Тем не менее, в отличие

от диссоциативной рекомбинации (1.5), процесс резонансного трехчастичного захвата (1.6), хотя и имеет схожую природу, на данный момент мало изучен. В работах [71–73] были осуществлены полуклассические расчеты констант скоростей процессов (1.6) в астрофизической водородной и гелиевой плазме. Расчеты проводились для случаев локального термодинамического равновесия с использованием соотношения детального баланса между константой скорости резонансного захвата и полуклассической константой скорости резонансной прямой ионизации при столкновениях ридберговских и невозбужденных атомов. В недавней работе [15] были сделаны предварительные оценки, согласно которым резонансные неадиабатические процессы трехчастичного захвата могут привести к существенному росту коэффициента рекомбинации в низкотемпературной плазме смесей инертных газов. Этот факт указывает на необходимость более подробного исследования механизма (1.6), а также разработки теоретических подходов для расчета и анализа динамических и кинетических характеристик данного процесса.

1.4. Диссоциативная рекомбинация молекулярных ионов с электронами с образованием атомов в слабозвозбужденных и ридберговских состояниях

Ввиду особой важности процесса (1.5) для физики лабораторной и астрофизической плазмы проведено огромное количество работ по изучению диссоциативной рекомбинации (см., например, обзоры [74–76] и книги [77–81]). Экспериментальные исследования процессов (1.5) основаны на методах стационарного и проточного послесвечения [74, 82–84], на использовании ударных труб [74, 85], установок с совмещенными пучками [86, 87] и ионных накопительных колец [88–91]. Объектами исследования выступают молекулярные катионы, представляющие фундаментальный и астрофизический интерес (H_2^+ , H_3^+ , HeH^+ , H_2O^+), а также различные углеводороды (CH^+ , CH_2^+ и т. д.), катионы в атмосфере (NO^+ , N_2^+ , O_2^+ , CO^+) и инертные газы (He_2^+ , Ne_2^+ , Ar_2^+ , HeNe^+ и Xe_2^+). Обширный обзор изученных систем и полученных результатов можно найти в [76, 77]. Экспериментальные методы развивались до такой степени, что стали возможными измерения констант скоростей и сечений процесса захвата на отдельно взятые конечные состояния (1.5) [76, 77, 83]. В большинстве исследований рассматривается заселение низколежащих атомных состояний продуктов

реакции. Для эффективного образования ридберговских состояний с высоким n обычно требуется, чтобы молекулярный ион был сильно колебательно возбужденным. Сечения и константы скорости диссоциативной рекомбинации, сопровождающейся заселением высоковозбужденных состояний, были измерены для простых молекул, таких как H_2^+ [92, 93], HD^+ [94], LiH^+ [95] и CH^+ [90], в то время как экспериментальные результаты для молекулярных ионов инертных газов, кроме He_2^+ , крайне редки. Были получены некоторые данные для Xe_2^+ [96, 97], Ar_2^+ [98] и Ne_2^+ [99], хотя результаты по сечениям или константам скорости не были представлены. В цикле работ по диссоциативной рекомбинации HeNe^+ [2] исследовалась динамика заселенности низколежащих состояний Ne с использованием техники послесвечения. В полученных результатах для коэффициентов рекомбинации наблюдалось сильное влияние сторонних процессов. Процессы рекомбинации с участием гетероядерных ионов тяжелых инертных газов остаются в значительной степени неизученными.

Экспериментальные исследования диссоциативной рекомбинации дополняются многочисленными теоретическими работами (см. обзоры [75, 76] и книги [77–81]). В основе большинства недавних работ лежит использование формализма теории многоканального квантового дефекта (Multi-Channel Quantum Defect Theory, MQDT) [100]. MQDT-подход позволяет самосогласованно описывать как прямые, так и непрямые механизмы диссоциативной рекомбинации и обычно дает надежные результаты в хорошем согласии с экспериментом [76, 77]. Практическая реализация MQDT требует точных входных данных (матричные элементы, волновые функции и R -зависимые квантовые дефекты), которые требуют обширных вычислений с использованием молекулярного R -матричного подхода [101] или вариационного метода Кона [102]. MQDT был успешно применен для исследования диссоциативной рекомбинации ионов H_2^+ [103–105], H_3^+ [106], HeH^+ [107, 108], N_2^+ [109, 110] и многих других ионов, важных для задач астрофизики и физики планетарных атмосфер. Альтернативный подход основан на методе зависящего от времени волнового пакета (TDWP) [77]. Хотя он требует еще более сложных вычислений, он обладает определенным преимуществом прямой идентификации состояний конечного продукта. Метод успешно использовался в исследованиях HeH^+ [111], HD^+ [112], Ar_2^+ [113] и ряда других ионов.

1.4.1. Теоретические модели диссоциативной рекомбинации

Применение описанных выше теоретических методов к сложным системам, таким как плазма комнатной температуры, содержащая гетероядерные катионы инертных газов, требует огромных вычислительных усилий, особенно когда возбуждается большое количество колебательных состояний. В связи с этим, значительное число теоретических исследований посвящено разработке упрощенных теоретических моделей диссоциативной рекомбинации, дающих сравнительно простые аналитические или полу-аналитические выражения для коэффициентов рекомбинации. Важность подобных исследований в существенной степени связана с тем, что при создании радиационно-столкновительных моделей чистой плазмы или плазмы смесей инертных газов, учитывающих огромное количество различных столкновительных процессов, используются именно простые аналитические формулы для описания вклада диссоциативной рекомбинации.

Одним из наиболее распространенных теоретических подходов для упрощенного анализа диссоциативной рекомбинации является использование приближения одного автоионизационного состояния, в рамках которого сечение диссоциативной рекомбинации может быть описано формулой (см., например, [114])

$$\sigma^{\text{dr}}(\varepsilon) = \int \sigma_{\varepsilon}^{\text{dr}}(R) |\Psi(R)|^2 dR \exp\left(-\int_R^{R_{\text{st}}} \frac{\Gamma dR}{\hbar v_R}\right),$$

$$\sigma_{\varepsilon}^{\text{dr}}(R) = \frac{\pi \hbar^2}{2m\varepsilon} \frac{(\Gamma(R))^2}{[\varepsilon - \varepsilon_r(R)]^2 + (\Gamma(R))^2/4}. \quad (1.19)$$

Здесь $\sigma_{\varepsilon}^{\text{dr}}(R)$ — сечение захвата электрона с энергией ε на автоионизационный уровень при межъядерном расстоянии R ; $\varepsilon_r(R)$ — резонансная энергия налетающего электрона; $|\Psi(R)|$ — ядерная волновая функция молекулярного иона VA^+ . Экспоненциальный множитель — это так называемый фактор выживания, учитывающий вероятность обратного распада из автоионизационного состояния квазимолекулы до разлета ядер, так что $\Gamma(R)$ — это ширина автоионизационного уровня, а v_R — радиальная компонента скорости относительного движения ядер. Величина R_{st} обозначает так называемую точку стабилизации, за пределами которой (т.е. при $R > R_{\text{st}}$) обратная автоионизация становится невозможной. Точка стабилизации есть точка пересечения отталкивательного термина с термом квазимолекулярного иона.

Выражение для коэффициента рекомбинации $\alpha^{\text{dr}}(T_e)$ при электронной тем-

пературе T_e получается в результате усреднения величины $v_e \sigma^{\text{dr}}(\varepsilon)$, где v_e — скорость налетающего электрона. В случае распределения Максвелла формула для $\alpha^{\text{dr}}(T_e)$ имеет вид

$$\alpha^{\text{dr}}(T_e) = \frac{2\sqrt{2\pi\hbar^2}}{mk_{\text{B}}T_e} \left\langle \Gamma(R) \exp\left(-\frac{\varepsilon_r(R)}{k_{\text{B}}T_e} - \int_R^{R_{\text{st}}} \frac{\Gamma dR}{\hbar v_R}\right) \right\rangle. \quad (1.20)$$

Здесь угловые скобки означают усреднение по распределению ядер в молекулярном ионе по относительному расстоянию между ними. В оптимальном случае, если обратной автоионизацией можно пренебречь, а также $\Gamma \sim k_{\text{B}}T_e$ и $\varepsilon_r \sim k_{\text{B}}T_e$, указанное выражение дает простую зависимость $\alpha^{\text{dr}}(T_e) \sim T_e^{-1/2}$, многократно наблюдавшуюся в экспериментах. Соответствующие оценки величины $\alpha^{\text{dr}}(T_e)$ дают характерные значения коэффициента диссоциативной рекомбинации 10^{-7} см³/с, также традиционно наблюдаемые в экспериментальных работах.

Недостаток представленного выше подхода состоит в том, что он подразумевает наличие только одного автоионизационного состояния, в которое идет эффективно идет диссоциативная рекомбинация. С другой стороны, целый ряд работ посвящен созданию относительно простых теоретических моделей диссоциативной рекомбинации в условиях возбуждения множества колебательных состояний. Так, в работе [93] была приведена упрощенная теоретическая модель для молекулярных ионов H_2^+ . В этой работе электронные переходы рассматривались в рамках теории возмущений, и сечение диссоциативной рекомбинации рассчитывалось по простой формуле [115]:

$$\sigma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_f | U | \Psi_I \rangle|^2,$$

где U — потенциал взаимодействия налетающего электрона и молекулярного иона H_2^+ , а Ψ_i и Ψ_f — волновые функции столкновительной системы в начальном и конечном состоянии. Для того, чтобы сечение имело нужную размерность, волновая функция начального состояния налетающего электрона была нормирована на единицу потока. В рамках используемого в работе [93] подхода динамика ядер описывалась квантовыми уравнениями рассеяния. Было продемонстрировано хорошее согласие между теоретическими расчетами с использованием данного подхода и экспериментом. Отметим, что формула, полученная в работе Бейтса [116], также основанная на теории возмущений, дает разумные оценки, когда прямой механизм диссоциативной рекомбинации доминирует [117].

Среди достоинств теоретического подхода, приведенного в работе [93], отметим, что в нем был учтен немаксвелловский характер относительного движения электронов и молекулярных ионов в опытах с конфигурацией совмещенных пучков. Указанная конфигурация является одной из наиболее распространенных при экспериментальном исследовании (см., например, книгу [77] и ссылки в ней) ввиду большого времени взаимодействия частиц, а также возможности реализации экспериментов при сколь угодно малых энергиях относительного сближения сталкивающихся частиц. Тем не менее, специфика относительного движения частиц в данной конфигурации крайне редко учитывается при теоретическом моделировании диссоциативной рекомбинации, и в большинстве теоретических работ для описания относительного движения электронов и молекулярных ионов используется стандартное распределение Максвелла. Исследование влияния конфигурации совмещенных пучков на динамику процесса диссоциативной рекомбинации (1.5) и близкого ему процесса резонансного трехчастичного захвата (1.6) является одной из важных задач данной диссертации.

Относительно простой теоретический подход для описания диссоциативной рекомбинации был предложен и развит в работах [71, 72, 118, 119]. В основе данного подхода лежит рассмотрение обратного процесса ассоциативной ионизации $A(n) + A \rightarrow A_2^+ + e$ с уровня n . Для описания данного процесса ассоциативной ионизации используется вероятность $P_d(t)$ распада начального электронного состояния до времени t , описываемая уравнением

$$\frac{dP_d(t)}{dt} = [1 - P_d(t)]W_n(R(t)), \quad (1.21)$$

где $W_n(R)$ есть скорость распада на межъядерном расстоянии R . С учетом граничного условия в начальный момент времени $P_d(t_0) = 0$ получается следующее выражение для $P_d(t)$:

$$P_d(t) = 1 - \exp\left(-\int_{t_0}^t W_n(R(t'))dt'\right). \quad (1.22)$$

Далее с помощью выражения для $P_d(t)$ рассчитывается вероятность $P^{\text{ai}}(n, \rho, E)$ ассоциативной ионизации с уровня n при заданном значении прицельного параметра ρ и энергии относительного движения частиц E . Выражение для сечения ассоциативной ионизации рассчитывается путем интегрирования по прицельному параметру:

$$\sigma^{\text{ai}}(n, E) = 2\pi \int_0^{\rho_{\text{max}}(E)} P^{\text{ai}}(n, \rho, E)\rho d\rho, \quad (1.23)$$

$\rho_{\max}(E)$ — верхнее классически допустимое значение прицельного параметра при данном E . Наконец, выражение для сечения диссоциативной рекомбинации выводится с помощью соотношения детального баланса (1.13) между двумя взаимно обратными процессами. Одно из главных достоинств представленного подхода состоит в том, что он дает полу-аналитические выражения для констант скоростей диссоциативной рекомбинации на уровень n в зависимости от электронной и газовой температуры, а также позволяет рассматривать близкие резонансные механизмы диссоциативной рекомбинации, резонансного трехчастичного захвата и переходов между ридберговскими уровнями единым образом. В работе [118] исследовалась ассоциативная ионизация в случае лития и натрия, и было продемонстрировано хорошее совпадение теоретических расчетов на основе данного подхода с экспериментальными результатами. Кроме того, в работах [71, 72] данный подход использовался для расчетов констант скорости диссоциативной рекомбинации ионов H_2^+ на ридберговские уровни при условиях, характерных для плазмы фотосферы Солнца. К недостаткам подхода можно отнести тот факт, что его применимость ограничена рассмотрением движения ядер лишь в классически разрешенных областях.

Основные недостатки представленных выше теоретических подходов из работ [93] и [72] состоят в относительно высокой трудоемкости расчетов при учете большого числа колебательно-вращательных уровней молекулярных ионов. Эта трудность была устранена в работе [62] при рассмотрении задачи об обратном процессе ассоциативной ионизации за счет представленного в ней теоретического подхода, основанного на использовании стационарной теории возмущения в приближении Борна–Оппенгеймера и квантовомеханической версии теории неадиабатических переходов. Представленный подход дает относительно простые полуаналитические выражения для констант скоростей ассоциативной ионизации с учетом большого числа колебательно-вращательных состояний иона в конечном канале реакции. Однако, на данный момент не получены полуаналитические выражения для констант скоростей диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов инертных газов в условиях сильного возбуждения vJ -состояний.

Обобщая сказанное в данном разделе, отметим, что одна из главных сложностей при теоретическом исследовании процессов диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов инертных газов заключается в отсутствии относительно простых теоретических подходов, позволяющих учитывать вклад боль-

шого числа колебательно–вращательных уровней. Приведенные выше подходы оказываются неприменимыми при данных условиях (как модель одного автоионизационного состояния), либо лишь частично упрощают численные процедуры (как подходы из работ [93] и [72]). По этой причине, основным источником сведений о диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов инертных газов по–прежнему остаются экспериментальные исследования [114]. По этой же причине при составлении радиационно–столкновительных моделей плазмы инертных газов для описания диссоциативной рекомбинации используются простые эмпирические формулы, применимость которых определяется не условиями, рассматриваемыми в моделях, а условиями экспериментов, в ходе которых данные формулы были получены. Одна из основных задач, рассмотренных в данной диссертации, состояла в разработке оригинального теоретического подхода, позволяющего получить относительно простые формулы для сечений и констант скоростей диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов, которые могут быть использованы для надежных расчетов в широком диапазоне параметров, характерных для лабораторной низкотемпературной плазмы смесей инертных газов.

1.4.2. Диссоциативная рекомбинация гетероядерных ионов инертных газов

Большое количество экспериментальных и теоретических работ было посвящено исследованию резонансного механизма диссоциативной рекомбинации (1.5) в плазме чистых инертных газов и их смесей. Значительное число подобных исследований проведено для диссоциативной рекомбинации гомоядерных ионов He_2^+ , Ne_2^+ , Ar_2^+ , Kr_2^+ и Xe_2^+ (см., например, работы [109, 114, 120–123] и приведенные там ссылки). При этом количество экспериментальных работ, посвященных исследованию процессов диссоциативной рекомбинации гетероядерных ионов, оказывается существенно меньше. Их теоретическое описание также оказывается весьма фрагментарным и не дает целостной картины поведения соответствующих сечений и констант скоростей диссоциативной рекомбинации и надежных количественных результатов. Детальные экспериментальные данные были получены сравнительно недавно [2, 124–126] только для гетероядерных ионов HeNe^+ . Также имеются полуэмпирические оценки констант скорости диссоциативной рекомбинации гетероядерных ионов ArXe^+ [127, 128] и NeXe^+ [129, 130], полученные на основе простейших теоретических моделей [131, 132].

Однако результаты соответствующих расчетов существенно расходятся с экспериментальными данными в области высоких температур [121], а сами модели дают ограниченное представление о протекающих явлениях, поскольку не описывают процессы захвата на отдельно взятые атомные уровни.

Важно отметить, что в большинстве исследований диссоциативной рекомбинации (3.1) в ионных пучках и в низкотемпературной плазме рассматриваются условия, когда $k_B T \ll D_0$, где T — газовая температура, а D_0 — энергия диссоциации молекулярного иона. Это значит, что заселена лишь малая часть колебательно-вращательных уровней. Такие условия наблюдаются в чистых (беспримесных) плазмах инертных газов. Иная ситуация наблюдается в плазме смесей инертных газов Rg/Xe (Rg = He, Ne, Ar и Kr), в которой содержатся преимущественно атомные ионы Xe^+ и, в меньшей степени, гетероядерные ионы RgXe^+ с низкими или умеренными значениями энергии диссоциации $D_0 = 13.1 - 400$ мэВ. Концентрации гомоядерных ионов Xe_2^+ во многих случаях оказываются сравнительно малыми при выполнении часто реализуемых условий $[\text{Xe}] \ll [\text{Rg}]$. В ряде же других задач приобретает важность вопрос о сравнительном анализе диссоциативной рекомбинации гомоядерных и гетероядерных ионов инертных газов. Данный вопрос имеет принципиальное значение, в частности, в случае, когда требуется селективное заселение отдельно взятых уровней, как, например, при реализации инфракрасных ксеноновых лазеров на смеси инертных газов, и был в той или иной степени рассмотрен в работах [12, 128, 133, 134]. При этом необходимо знание величин констант скорости диссоциативного захвата α_n^{dr} электронов ионами с образованием атомов в широком наборе высоковозбужденных состояний n , поскольку селективное заселение требуемых уровней может проходить как напрямую, так и в результате каскада процессов девозбуждения [133]. В этом контексте большое значение имеет сравнительный анализ величин α_n^{dr} для систем A_2^+ и BA^+ при захвате на высокие n . На данный момент нет однозначного ответа на вопрос, какой канал диссоциативной рекомбинации (гомоядерные или гетероядерные ионы) вносит решающий вклад в динамику заселения рабочих уровней в активных средах лазеров на смесях инертных газов.

1.5. Прямое диссоциативное возбуждение молекулярных ионов электронным ударом

Изучению резонансных процессов диссоциативного возбуждения (1.8) посвящено большое количество статей. При этом наибольшее внимание уделено исследованию диссоциации молекулярных ионов водорода и его изотопов: им посвящен целый ряд как экспериментальных (H_2^+ [135–137], H_3^+ [138]), так и теоретических работ (H_2^+ [105, 139–144], H_3^+ [145, 146], HD^+ [147], D_2^+ и T_2^+ [142]). Высокий интерес к исследованию диссоциативного возбуждения (ДВ) молекулярных ионов водорода связан с существенной ролью данного процесса в кинетике астрофизической плазмы, а также в физике ранней вселенной [6]. Среди прочих ионов, представляющих интерес при изучении ДВ, можно выделить O_2^+ [148] и N_2^+ [149, 150], играющие важную роль в химии планетарных ионосфер.

В ряде работ по исследованию процесса (1.8) рассматриваются процессы ДВ молекулярных ионов инертных газов, ввиду важности их учета при разработке столкновительно–радиационных моделей лабораторной низкотемпературной плазмы. В экспериментальных работах по Ar_2^+ [151] и Xe_2^+ [152], а также в теоретической работе [153] было показано, что эффективность процесса ДВ (1.8) сопоставима с эффективностью диссоциативной рекомбинации (1.5) при электронных температурах $T_e \approx 10000$ К. Несмотря на это, теоретические сведения о сечениях и константах скорости диссоциативного возбуждения молекулярных ионов инертных газов крайне ограничены.

Наиболее полное теоретическое описание процесса (5.1) для таких ионов было дано в работе [154], где были представлены квазиклассические формулы для сечений диссоциативного возбуждения. На основе этих выражений в работах [153, 155] были получены полуэмпирические оценочные формулы для расчета соответствующих констант скоростей ДВ ионов He_2^+ и Ar_2^+ . Эти формулы использовались в [8–11] при построении кинетических моделей аргоновой плазмы атмосферного давления в рамках разработки лазеров с оптической накачкой на инертных газах (OPRGL). Применимость указанных формул существенно ограничена диапазоном температур $T_e \lesssim 2$ эВ. Отметим также, что на данный момент не известно о каких–либо имеющихся результатах исследований ДВ гетероядерных ионов инертных газов, таких как ArXe^+ и HeXe^+ . Их изучение, однако, представляет значительный интерес, поскольку такие ионы образуются

в низкотемпературных плазмах смесей инертных газов, представляющих интерес для ряда практических приложений, включая разработку эксимерных ламп и газовых лазеров [12, 134, 156].

Одна из главных задач при исследовании механизма ДВ (1.8) заключается в его сравнительном анализе с диссоциативной рекомбинацией (1.5). Подобное сравнение было проведено в ряде работ для молекулярных ионов водорода и его изотопов (см., например, [136, 142–144]), а также ионов, образующихся в планетарных атмосферах [148, 149]. С другой стороны, сведения о конкуренции процессов (1.5) и (1.8) в случае молекулярных ионов инертных газов весьма ограничены. В работах [151] и [152] были экспериментально получены полные константы скорости разрушения ионов Ar_2^+ и Xe_2^+ с учетом обоих процессов (1.5) и (1.8), а также сделаны качественные оценки, указывающие, при каких температурах T_e доминирует тот или иной резонансный канал распада молекулярного иона. В свою очередь, в теоретической работе [153] были проведены оценочные расчеты констант скоростей процессов (1.5) и (1.8), однако применимость используемых выражений была ограничена областью низких температур $T_e \lesssim 2$ эВ.

Глава 2. Нерезонансный захват электрона ионом в тройных столкновениях с нейтральными частицами

2.1. Нерезонансный механизм захвата электрона и соотношение детального баланса

Данная глава посвящена рассмотрению нерезонансного механизма свободно-связанных переходов электрона в тройных столкновениях с атомарными ионами и нейтральными атомными частицами:



В рамках модели квазисвободного электрона будут получены общие формулы для эффективного сечения этого трехчастичного процесса и на их основе выведены простые аналитические аналитические и полуаналитические выражения. В отличие от механизма резонансного захвата электрона (1.6), в процессе нерезонансного захвата (2.1) кинетическая энергия электрона $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ вместе с энергией связи ридберговского электрона $|\varepsilon_{nl}| = Ry/n_*^2$ непосредственно передается в кинетическую энергию относительного движения частиц $A(nl)$ и B .

Для теоретического описания этого процесса было использовано приведенное в Главе 1 соотношение детального баланса (1.13) между эффективным сечением $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{cap}}(E)$ [см⁴·с] трехчастичного захвата (2.1) в процессе свободно-связанного перехода электрона $\varepsilon \rightarrow nl$ вместе с дифференциальным сечением, $d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{\text{di}}(E')/d\varepsilon$ [см²·эрг⁻¹], обратного процесса прямой ионизации атома $A(nl)$ при столкновении с атомом B буферного газа. Здесь $E = \hbar^2 q^2 / 2\mu$ и $E' = \hbar^2 (q')^2 / 2\mu$ — кинетические энергии относительного движения частиц A^+ и B в начальном и конечном каналах реакции (2.1). Выражение для сечения ионизации $d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{\text{di}}(E')/d\varepsilon$ было ранее получено в работе [17] с использованием импульс-

ного приближения (см. [16, 157]). В рамках модели квазисвободного электрона задача о столкновении атома буферного газа В с высоковозбужденным атомом $A(nl)$ сводится к задаче о рассеянии квазисвободного электрона e на атоме В. При этом электрон имеет распределение импульсов, создаваемое кулоновским полем ионного остова A^+ ридберговского атома $A(nl)$ в заданном квантовом состоянии nl .

2.2. Общее выражение для сечения нерезонансного захвата электрона ионом в импульсном приближении

В импульсном приближении (см. [16, 157]) дифференциальное сечение процесса нерезонансной прямой ионизации атома $A(nl)$ при столкновении с нейтральным атомом В в состоянии непрерывного спектра с энергией ε описывается формулой (1.12) из Главы 1. Данное выражение может быть переписано в более удобном виде [17]:

$$\frac{d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{\text{di}}(E')}{d\varepsilon} = \frac{\pi v_0^2}{2Ry(V')^2} \int_{Q_1}^{Q_2} dQ \int_{|\kappa_0(Q)|}^{\infty} \kappa d\kappa |g_{nl}(\kappa)|^2 [f_{eB}(\kappa, Q)]^2, \quad (2.2)$$

$$\kappa_0(Q) = [Q^2/2 - m_e(\varepsilon + |\varepsilon_{nl}|)/\hbar^2] / Q, \quad (2.3)$$

$$Q_{1,2}(E) = \sqrt{2\mu} \left| \sqrt{E + (\varepsilon + |\varepsilon_{nl}|)} \mp \sqrt{E} \right| / \hbar. \quad (2.4)$$

Здесь f_{eB} – амплитуда рассеяния ультрамедленного электрона на атоме В; $\hbar\kappa$ – импульс электрона, Q – переданный импульс; $|g_{nl}(\kappa)|^2$ – функция распределения импульсов электрона в состоянии nl , $V' = \hbar q' / \mu$ – относительная скорость атомов $A(nl)$ и В. В рамках введенных в Главе 1 обозначений $v_0 = \frac{e^2}{\hbar}$ – это атомная единица скорости, а $Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2}$ – постоянная Ридберга.

Подстановка (2.2) в формулу для соотношения детального баланса (1.13) дает исходное выражение для сечения нерезонансного захвата на уровень nl . Формула для сечения трехчастичного захвата на все водородоподобные lm -подуровни уровня n получается в результате суммирования по l :

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(E) = \sum_{l=0}^{n-1} \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{cap}}(E) = \frac{\mu}{m_e} \frac{\pi^3 n^2 \hbar^3 v_0^2}{2\varepsilon E 2Ry} \times \\ \times \int_{Q_1(E)}^{Q_2(E)} dQ \int_{|\kappa_0(Q)|}^{\infty} \kappa d\kappa |g_n(\kappa)|^2 |f_{eB}(\kappa, Q)|^2. \quad (2.5)$$

Здесь функция распределения импульсов электрона $|g_n(\kappa)|^2$ с нормировкой

$$\int_0^{\infty} |g_n(\kappa)|^2 \kappa^2 d\kappa = 1$$

определяется формулой Фока (см. формулу (2.138) в [16]):

$$|g_n(\kappa)|^2 = \sum_{l=0}^{n-1} \frac{2l+1}{n^2} |g_{nl}(\kappa)|^2 = \frac{2^5 (na_0)^3}{\pi [1 + (n\kappa a_0)^2]^4}, \quad (2.6)$$

где $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ – боровский радиус. В данной работе конкретные расчеты сечений нерезонансного захвата электронов на n -уровни были проведены для ридберговских состояний с $n \gg 1$. Высоковозбужденные n -уровни произвольного атома с $l \gtrsim 2$ являются практически вырожденными. Вклады состояний $l \lesssim 2$ обычно пренебрежимо малы для $n \gg 1$. Для единообразности учета как водородоподобных состояний, так и состояний $A(nl)$ с существенным квантовым дефектом, можно заменить (2.5) выражением

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(E) = \sum_l \zeta_{l_0 n} \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{cap}}(E), \quad \zeta_{l_0 n} = 1 - l_0^2/n^2, \quad (2.7)$$

обеспечивающим хорошее приближение к точному результату. Здесь l_0 – минимальное значение орбитальных квантовых чисел атома $A(nl)$, для которого nl -состояния с $l \geq l_0$ можно считать вырожденными ($\delta_l \approx 0$). Фактор $\zeta_{l_0 n}$ описывает долю неводородоподобных состояний, соответствующих данному n , и выражается через отношение статистических весов, $(g_n - g_0)/g_n$, а $g_0 = l_0^2$ – сумма статистических весов первых нескольких состояний с $l < l_0$. Для ридберговских состояний с $n \gg 1$, в первую очередь рассматриваемых здесь при обсуждении роли нерезонансного механизма захвата, имеем $l_0 \ll n$, так что $\zeta_{l_0 n} \approx 1$.

Выражение для амплитуды упругого рассеяния электрона на атоме В и дифференциального сечения, $d\sigma_{\text{eB}}/d\Omega$, усредненного по возможным значениям, $S_+ = s_B + 1/2$ и $S_- = |s_B - 1/2|$, полного спина, S , системы В+е, имеет вид [115]:

$$f_{\text{eB}}^{(S)}(\kappa, \theta) = \sum_{\ell} (2\ell + 1) f_{\ell}^{(S)}(\kappa) P_{\ell}(\cos \theta),$$

$$f_{\ell}^{(S)} = \left[\kappa \cot(\eta_{\ell}^{(S)}) - i\kappa \right]^{-1}, \quad (2.8)$$

$$\frac{d\sigma_{\text{eB}}}{d\Omega} = |f_{\text{eB}}(\kappa, \theta)|^2 = \sum_S C(S) \left| f_{\text{eB}}^{(S)}(\kappa, \theta) \right|^2. \quad (2.9)$$

Здесь $f_{\ell}^{(S)}(\kappa)$ и $\eta_{\ell}^{(S)}(\kappa)$ – амплитуда и сдвиг фазы парциальной волны с орбитальным моментом ℓ ; θ – угол рассеяния; $C(S) = (2S + 1)/[2(2s_B + 1)]$ – спиновый фактор, s_B – спин атома В. Для атомов инертного газа в основном состоянии $s_B = 0$, так что $S_+ = S_- = 1/2$ и $C(S_+) = C(S_-) = 1/2$. В то же время, для

атомов щелочных металлов имеются триплетные ($S_+ = 1$, $C(S_+) = 3/4$) и синглетные ($S_- = 0$, $C(S_-) = 1/4$) волны в рассеянии электрона.

Для потенциального рассеяния электрона на атоме В с относительно невысокой поляризуемостью α (как в случае атомов инертных газов) можно использовать результаты модифицированной теории эффективного радиуса [158]. При этом парциальные фазовые сдвиги $\eta_\ell(k)$ определяются выражениями

$$\begin{aligned} \kappa^{-1} \tan(\eta_0) &= -L - \pi\alpha\kappa/(3a_0) - 4\alpha L\kappa^2 \ln(\kappa a_0)/(3a_0) \\ &\quad + D_0\kappa^2 + F_0\kappa^3 + O(\kappa^4), \\ \kappa^{-1} \tan(\eta_\ell) &= \pi\alpha\kappa [a_0(2\ell + 3)(2\ell + 1)(2\ell - 1)]^{-1} + D_\ell\kappa^2 + O(\kappa^3), \ell \geq 1, \end{aligned} \quad (2.10)$$

где L — длина рассеяния электрона на атоме В. Величины η_ℓ быстро падают с ростом ℓ . В рамках данной теории квадрат амплитуды рассеяния может быть описан следующей формулой

$$|f_{eB}(\kappa, Q)|^2 = L^2 + \frac{\pi\alpha_B L Q}{2a_0} + \frac{8\alpha_B L^2}{3a_0} \kappa^2 \ln(\kappa a_0) + b\kappa^2, \quad Q = 2\kappa \sin(\theta/2), \quad (2.11)$$

где L — длина рассеяния, и b — коэффициент разложения.

2.3. Аналитические выражения для сечений и констант скоростей трехчастичного захвата в приближении длины рассеяния

Если известны значения поляризуемости α_B , длины рассеяния L и (опционально) коэффициента разложения b , то с помощью формул (2.5) и (2.11) можно проводить численные расчеты сечений $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(E)$ и констант скоростей $\beta_n^{\text{cap}}(T, T_e) = \langle v_\varepsilon \langle V_E \sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(E) \rangle_T \rangle_{T_e}$ [см⁴·с] нерезонансного трехчастичного захвата. Однако, для дальнейшей оптимизации расчетов и получения сравнительно простых аналитических и полу-аналитических выражений необходимо использование ряда дополнительных приближений, ключевое из которых — приближение длины рассеяния, согласно которому полагается $f_{eB} = -L$. В этом случае выражение (2.5) принимает вид

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(E) = \frac{\mu}{m_e} \frac{2^4 \pi^2 n^2 \hbar^3 v_0^2}{\varepsilon E} L^2 I_{\varepsilon \rightarrow n}(E) \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} I_{\varepsilon \rightarrow n} &= \frac{\pi}{2^5} \int_{Q_1}^{Q_2} dQ \int_{|\kappa_0(Q)|}^{\infty} \kappa d\kappa |g_n(\kappa)|^2 \\ &= \int_{y_1}^{y_2} dy \int_{|x_0(y)|}^{\infty} \frac{x}{(1+x^2)^4} dx, \quad x = n\kappa a_0, \end{aligned} \quad (2.13)$$

где $y = nQa_0$, $y_{1,2} = nQ_{1,2}a_0$, $x_0(y) = n|\kappa_0(Q)|a_0$, и Q_i определяется формулой (2.3) с заменой $|\varepsilon_{nl}| \rightarrow |\varepsilon_n| = Ry/(n^2)$. Интегрирование выражения (2.13) приводит к следующей формуле:

$$I_{\varepsilon \rightarrow n} = \mathcal{F}(x)|_{x_1}^{x_2} + \mathcal{H}(z)|_{z_1}^{z_2} + \frac{y}{6} (1+x^2)^{-3} \Big|_{x_1 y_1}^{x_2 y_2}, \quad (2.14)$$

$$x_i = n|\kappa_0(Q_i)|a_0, \quad z_i = \left(\frac{x_i^2 + (\varepsilon n^2/Ry)}{\varepsilon n^2/Ry} \right)^{1/2}, \quad i = 1, 2;$$

$$\mathcal{F}(x) = \frac{\arctan(x)}{16} + \frac{x(3x^4 + 8x^2 - 3)}{48(x^2 + 1)^3};$$

$$\mathcal{H}(z) = 2^{-5} \ln \left(\frac{z-1}{z+1} \right) + \frac{z(3z^4 - 8z^2 - 3)}{48(z^2 - 1)^3}.$$

Имеется возможность дальнейшего упрощения выражений для $I_{\varepsilon \rightarrow n}$ и, соответственно, для $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(E)$. Для этого используются два приближения:

$$|\kappa_0(Q)| \approx Q/2, \quad |g_n(\kappa)|^2 \approx 2^5 / \left[\pi (na_0)^5 \kappa^8 \right] \quad (2.15)$$

в формуле (2.13). Вводя обозначение для передаваемой энергии, $\Delta\varepsilon \equiv \varepsilon + |\varepsilon_n|$, получим следующую формулу для двойного интеграла $I_{\varepsilon \rightarrow n}$ с учетом данных приближений:

$$I_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{app}} = 2^6 \frac{\sqrt{E} [5(\Delta\varepsilon)^2 + 20E\Delta\varepsilon + 16E^2]}{15n^5(\mu/m_e)^{5/2}(\Delta\varepsilon)^5} Ry^{5/2}. \quad (2.16)$$

Базовое выражение для константы скорости, $K_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(T) = \langle V \sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(E) \rangle_T$ [см⁵], трехчастичного захвата на ридберговский уровень n при газовой температуре T и начальной энергии электронов ε получается из формул (2.12) и (2.16) в результате усреднения по функции распределения, $f_T(E)$, кинетической энергии столкновительной системы A^+ и B ($E = \mu V^2/2$). Данное выражение может быть записано в виде

$$K_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(T) = \langle V \sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(E) \rangle_T = \frac{\mu}{m_e} \frac{2^4 \pi^2 n^2 \hbar^3 v_0^2}{\varepsilon 2Ry} L^2 \mathcal{I}_{\varepsilon \rightarrow n}(T), \quad (2.17)$$

$$\mathcal{I}_{\varepsilon \rightarrow n}(T) = \int_0^\infty E^{-1} \sqrt{2E/\mu} f_T(E) I_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{app}}(E) dE. \quad (2.18)$$

Используя приближенную формулу (2.16) и усредняя по функции распределения Максвелла, $f_T^M(E)$, получим простое выражение для тройного интеграла (2.18):

$$\mathcal{I}_{\varepsilon \rightarrow n}(T) = \left[2^4 m_e^{5/2} (k_B T)^2 (2Ry)^{5/2} / (3n^5 \mu^3) \right] \quad (2.19)$$

$$\times \left[(\Delta\varepsilon/(k_B T))^2 + 6\Delta\varepsilon/(k_B T) + 12 \right] / (\Delta\varepsilon)^5. \quad (2.20)$$

Константа скорости, β_n^{cap} [$\text{см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$], захвата электронов на все lm -подуровни уровня n получается в результате усреднения $\langle v_\varepsilon \langle V_E \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{cap}}(E) \rangle_T \rangle_{T_e}$ по функциям распределения скоростей электронов и ядер при электронных, T_e , и газовых температурах T . Используя приближения (2.15) в выражении (2.12) для $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{cap}}(E)$ и усредняя по функциям распределения Максвелла, получим аналитическую формулу для β_n^{cap} :

$$\beta_n^{\text{cap}}(T, T_e) = v_0 a_0^3 L^2 \sqrt{2^{18} \pi^3 \vartheta} \frac{m_e^2 T^2}{3 \mu^2 T_e^2} \left\{ 48 n^5 + \frac{16 T_e n^3}{\vartheta T} + \frac{1}{n} \left(\frac{2}{\vartheta} \right)^4 \left(1 - \frac{T_e}{T} \right)^2 \right. \\ \left. \times \left[\frac{1}{2 n^2} E_1 \left(\frac{1}{\vartheta n^2} \right) \exp \left(\frac{1}{n^2 \vartheta} \right) + \frac{\vartheta}{2} (n^2 \vartheta - 1) \right] \right\}, \\ E_1(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-t} dt}{t}, \vartheta = \frac{k_B T_e}{Ry} \quad (2.21)$$

Первый член в квадратных скобках (2.21) значительно превосходит прочие члены, что позволяет написать простое выражение:

$$\beta_n^{\text{cap}}(T, T_e) \approx v_0 a_0^3 \frac{L^2 m_e^2 T^2}{\mu^2 T_e^2} 2^{13} \sqrt{\pi^3 \vartheta} n^5 \left(1 + \frac{1}{3 n^2 \vartheta} \right). \quad (2.22)$$

Если газовая и электронная температура равны $T = T_e$, то члены с $(T - T_e)^2$ в (2.21) зануляются, и мы получаем простую аналитическую формулу для константы скорости захвата электрона ионом

$$\beta_n^{\text{cap}}(T) = v_0 a_0^3 \frac{L^2 m_e^2}{\mu^2} 2^{13} \sqrt{\pi^3 \vartheta T} n^5 \left(1 + \frac{1}{3 n^2 \vartheta T} \right), \quad (2.23)$$

где $\vartheta T = k_B T / Ry$.

Как известно из работы [17], при использовании импульсного приближения, приближения длины рассеяния, а также приближений (2.15) константа скорости нерезонансной ионизации $K_n^{\text{ion}}(T)$ [$\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$] с уровня n выражается формулой

$$K_n^{\text{ion}}(T) = v_0 \frac{2^{10} \vartheta T^2}{\mu^2} \cdot L^2 n^3 \left(1 + \frac{1}{3 n^2 \vartheta T} \right) e^{\frac{-1}{n^2 \vartheta T}} \quad (2.24)$$

Используя определения атомных единиц из Главы 1, а также определение величины ϑT , получим, что отношение величин $\beta_n^{\text{cap}}(T)$ к $K_n^{\text{ion}}(T)$:

$$\frac{\beta_n^{\text{cap}}(T)}{K_n^{\text{ion}}(T)} = \left(\frac{2 \pi \hbar^2}{m_e k_B T} \right)^{3/2} n^2 \exp \left(\frac{Ry}{n^2 k_B T} \right) \quad (2.25)$$

удовлетворяет соотношению детального баланса для констант скоростей двух взаимно обратных процессов.

2.4. Критерии применимости теории

В рамках рассматриваемой модели при выводе аналитических выражений используются следующие приближения: приближение длины рассеяния, приближение $|\kappa_0(Q)| \approx Q/2$ и приближение упрощенных импульсных функций распределения $|g_n(\kappa)|^2$. Их применение, однако, ограничено по n при различных значениях температур критериями применимости приближений. Данные критерии для каждого из приближений выглядят следующим образом:

- приближение длины рассеяния:

$$n \gg \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha^2 \mu v_0^2}{a_0 L^2 2k_B T} \right)^{1/4}$$

- приближение $|\kappa_0(Q)| \approx Q/2$:

$$n \ll \frac{1}{2} v_0 \sqrt{\frac{\mu}{2E}} \approx \frac{1}{2} v_0 \sqrt{\frac{\mu}{2k_B T}}$$

- приближение упрощенных импульсных функций распределения:

$$n \ll \frac{1}{4} v_0 \sqrt{\frac{\mu}{2E}} \approx \frac{1}{4} v_0 \sqrt{\frac{\mu}{2k_B T}}$$

то есть критерии применимости для последних двух приближений совпадают по порядку величины.

Из критериев применимости следует, что точность аналитических выражений при относительно низких значениях n будет тем выше, чем выше газовая температура T . Наиболее удобными для расчетов системами $A^+ + B$ будут системы с малой приведенной массой, малой поляризуемостью α частиц буферного газа B и большой длиной рассеяния L на частицах B . Проведенные автором оценки на основе сравнения результатов численных и аналитических расчетов указывают на то, что аналитические выражения для сечений и констант скоростей нерезонансного трехчастичного захвата дают точность в пределах 30% при $n \gtrsim 25$ и точность в пределах 5% при $n \gtrsim 50$.

Необходимо отметить, что степень применимости и точности рассматриваемых приближений почти не зависит от электронной температуры T_e . Это обусловлено тем, что функции $Q_{1,2}(n, E, \varepsilon)$ и $\kappa_0(n, E, \varepsilon)$, определяющие пределы интегрирования по κ и Q , зависят от энергии свободного электрона ε гораздо слабее, чем от энергии относительного движения частиц E .

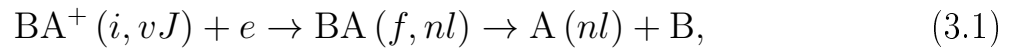
2.5. Выводы

В данной главе представлен теоретический подход для описания процесса нерезонансного захвата свободного электрона атомарным ионом в тройном столкновении с атомом буферного газа. В рамках импульсного приближения с использованием модифицированной теории эффективного радиуса дан вывод общего выражения для эффективного сечения нерезонансного захвата, приводящего к образованию атома в ридберговском состоянии при столкновениях с возмущающим атомом инертного газа. В приближении длины рассеяния получены наглядные аналитические формулы для сечения и константы скорости процесса.

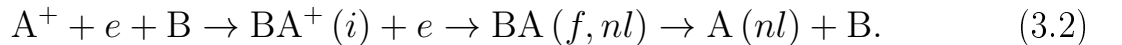
Глава 3. Резонансный захват электронов атомарными и молекулярными ионами в ридберговские состояния

3.1. Предварительные замечания

В этой главе будут рассмотрены различные механизмы заселения высоко-возбужденных состояний атомов в результате столкновительных процессов с участием нейтральных частиц и свободных электронов в плазме, содержащей как атомарные, так и молекулярные ионы. Основное внимание будет уделено резонансным процессам диссоциативной рекомбинации



и резонансного трехчастичного захвата при столкновениях с участием атомов буферного газа В:



Здесь v и J – колебательные и вращательные квантовые числа иона BA^+ , n и l – главное и орбитальное квантовые числа ридберговского атома $\text{A}(nl)$, $\varepsilon_{nl} = -Ry/n_*^2$ – его энергия, $n_* = n - \delta_l$ – эффективное главное квантовое число, а δ_l – квантовый дефект. Оба рассматриваемых здесь (3.1) и (3.2) происходят в результате механизма резонансного неадиабатического обмена энергии внешнего электрона e с внутренними электронами молекулярного иона и квазимолекулярного BA^+ , формирующегося в ходе столкновения частиц A^+ и В. Изучаемые неадиабатические переходы происходят вблизи точки пересечения R_ω начального, $U_i(R) + \varepsilon_{nl}$, и конечного, $U_f(R) + \varepsilon$ ($\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e$), электронных термов системы $\text{BA}^+ + e$ (см. рис. 3.1а). Главное отличие процесса диссоциативной рекомбинации (3.1) от резонансного трехчастичного захвата (3.2) состоит в том, что в первом случае квазимолекулярный ион находится в начальном связанном состоянии, а во втором случае – в состоянии непрерывного спектра (см.

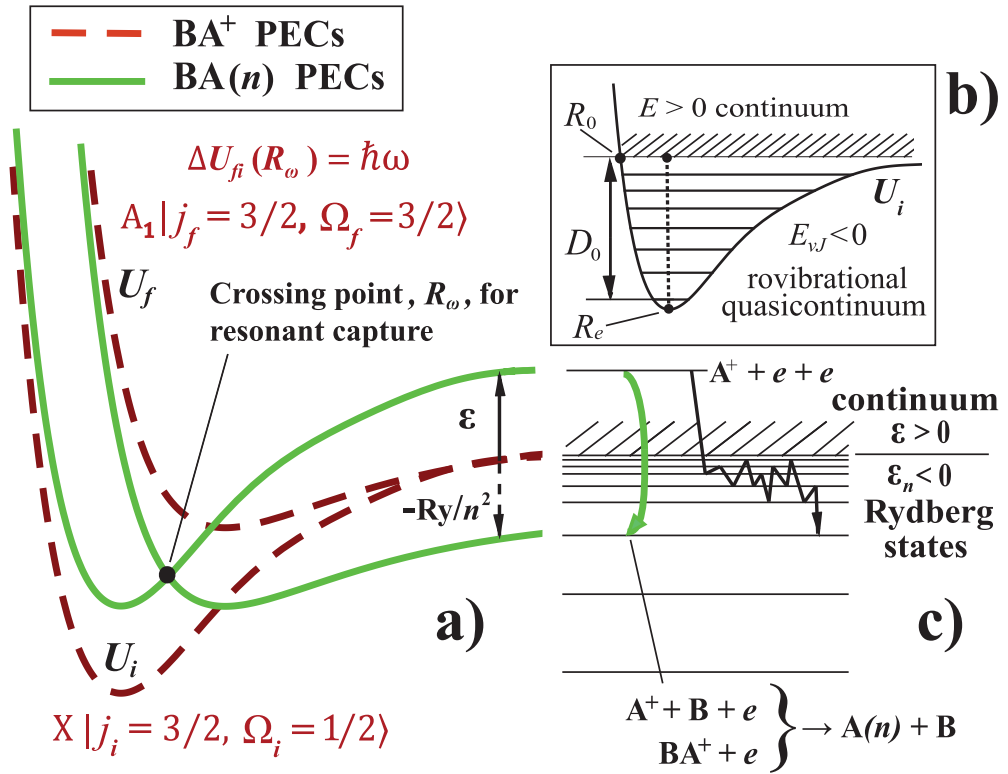


Рис. 3.1: (a) Потенциальные кривые $U_i(R)$ и $U_f(R)$ электронных термов $X|j_i = 3/2, \Omega_i = 1/2\rangle$ и $A_1|j_f = 3/2, \Omega_f = 3/2\rangle$ гетероядерных ионов $BA^+ \equiv RgXe^+$ (пунктирные кривые); кривые $U_i(R) + \epsilon$ и $U_f(R) - Ry/n_*^2$, квазимолекул $RgXe^+ + e$ (сплошные кривые) в начальных i и конечных f каналах реакций (3.1) и (3.2). (b) Континуум системы тяжелых частиц $Rg + Xe^+$ ($E > 0$) и колебательно-вращательные состояния ($E_{vJ} < 0$) молекулярного иона $RgXe^+$ в начальном электронном терме $U_i(R)$ с энергией диссоциации D_0 ; R_e — равновесное межъядерное расстояние, R_0 задается условием $U_i(R_0) = 0$. (c) Схематическое изображение процессов захвата электронов и релаксации в результате неупругих переходов $n \rightarrow n'$ при столкновениях со свободными электронами и нейтральными частицами.

рис. 3.1b). Важно отметить, что, несмотря на родственную природу этих двух процессов, сравнительно хорошо изученным остается лишь процесс диссоциативной рекомбинации (3.1).

Основные задачи, решаемые в этой главе, состоят в детальном теоретическом исследовании диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов (3.1) в условиях существенного теплового возбуждения огромного числа их колебательно-вращательных уровней, а также построение последовательной самосогласованной теории процесса резонансной тройной рекомбинации (3.2). Это включает в себя разработку единого аналитического подхода для описания обоих процессов и вывод основных формул для их эффективных сечений и констант скоростей. Будут установлены зависимости сечений и констант скоростей процессов (3.1) и (3.2) от главного квантового числа n , а также от свойств молекулярных ионов

VA^+ (в частности, от энергии диссоциации D_0) и от таких параметров плазмы, как газовая T и электронная температуры T_e . Кроме того, будут приведены результаты расчетов полной константы скорости резонансного захвата $\beta_n^{\text{res}}(T, T_e)$ [$\text{см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$] электронов на уровень n с учетом обоих процессов (3.1) и (3.2) в двух-температурной плазме.

Существенная доля представленных в этой главе конкретных расчетов и теоретический анализ эффективностей реакций (3.1) и (3.2) выполнены на примерах столкновительных систем $\text{Rg} + \text{Xe}^+ + e$ ($\text{Rg} = \text{Ne}, \text{Ar}$), возникающих в плазме смесей инертных газов Rg/Xe с малой относительной концентрацией ксенона $[\text{Xe}] \ll [\text{Rg}]$. Гетероядерные ионы инертных газов, RgXe^+ , имеют сравнительно небольшие (но существенно отличные друг от друга) значения энергии диссоциации D_0 основного электронного терма ($D_0^{\text{NeXe}^+} = 33$ мэВ, $D_0^{\text{ArXe}^+} = 171$ мэВ, [159, 160]). Поэтому их колебательно-вращательные состояния оказываются сильно возбужденными даже при сравнительно невысоких газовых температурах $T \sim 300 - 1000$ К. Реализация данного условия существенно отличает представленный в диссертации подход для анализа процессов (3.1) и (3.2) от большинства других теоретических подходов, практически ограниченных условием слабого возбуждения колебательных состояний молекулярных ионов VA^+ .

К важным задачам, рассмотренным в данной главе, относится также задача о сравнительном анализе эффективности и относительной роли исследуемых резонансных процессов диссоциативной рекомбинации (3.1) и трехчастичного захвата (3.2) при различных соотношениях тепловой энергии $k_B T$ и величины D_0 , а также в зависимости от электронной температуры, T_e , плазмы и энергии связи $|\varepsilon_n|$ ридберговского атома в конечных каналах реакций (3.1) и (3.2). В результате проведенных расчетов и анализа поведения констант скоростей исследуемых резонансных процессов будут определены параметры плазмы смесей инертных газов и найдены конкретные гетероядерные системы, для которых тот или иной канал (3.1) или (3.2) образования атомов в ридберговских состояниях является доминирующим. Другими словами, будут определены интегральные вклады состояний непрерывного спектра молекулярного иона и всего колебательно-вращательного квазиконтинуума в полные сечения и константы скорости образования атомов $\text{Xe}(n)$ в заданных ридберговских состояниях при различных температурах T и T_e неравновесной плазмы смесей инертных газов и выяснена роль атомов буферного инертного газа Ne или Ar в этих процессах. При этом будут рассмотрены случаи как равновесных, так и неравновесных

типов распределения по скоростям свободных электронов.

Еще одна задача, решенная в данной главе, связана со сравнительным анализом эффективности каналов диссоциативной рекомбинации гомоядерных Rg_2^+ и гетероядерных ионов RgXe^+ в плазме смесей инертных газов Rg/Xe . Эта задача крайне актуальна в контексте целого ряда исследований, связанных, в частности, с разработкой инфракрасных лазеров на переходе $5d \rightarrow 6p$ атома ксенона. Будут приведены результаты сравнительного анализа для смесей Kr/Xe , Ar/Xe и Ne/Xe .

Другая важная задача, рассмотренная в этой главе, связана со сравнением эффективности процессов (3.1) и (3.2) с традиционными механизмами захвата (1.3) и (1.1) в результате столкновений с нейтральными частицами и свободными электронами. Расчеты сечений и констант скоростей процессов (1.3) и (1.1) были проведены при этом по формулам, представленным в Главах 1 и 2 диссертации.

Для демонстрации достоверности используемых в данной работе теоретических подходов в этой главе представлены результаты сравнения расчетов коэффициентов диссоциативной рекомбинации (3.1) гетероядерных, NeXe^+ и ArXe^+ , и гомоядерных ионов инертных газов Ne_2^+ и Ar_2^+ с аналогичными результатами других теоретических и экспериментальных работ.

3.2. Постановка задачи. Исходные формулы

Полный гамильтониан квазимолекулы $\text{VA}^+ + e$ в системе центра масс записывается в следующем виде:

$$H = T_{\mathbf{R}} + H_{\text{VA}^+} + H_e + \mathbf{V}, \quad H_e = -\frac{\hbar^2 \Delta_{\mathbf{r}}}{2m_e} - \frac{e^2}{r} \quad (3.3)$$

Здесь $T_{\mathbf{R}} = -\hbar^2 \Delta_{\mathbf{R}}/2\mu$ – оператор кинетической энергии относительного движения ядер, ($\mathbf{R} = \mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B$ – радиус-вектор, соединяющий ядра, μ – их приведенная масса, H_e – гамильтониан внешнего электрона, а $H_{\text{VA}^+}(\mathbf{r}_{\kappa}, \mathbf{R})$ – электронный гамильтониан квазимолекулярного иона VA^+ в приближении Борна-Оппенгеймера. Оператор потенциальной энергии взаимодействия

$$\mathbf{V} = \sum_{\kappa} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\kappa}|} - \frac{Z_A e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_A|} - \frac{Z_B e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_B|} + \frac{e^2}{r} \quad (3.4)$$

определяется кулоновским взаимодействием внешнего электрона (\mathbf{r}) со всеми внутренними электронами (\mathbf{r}_{κ} , $\kappa = 1, \dots, N$) и ядрами (\mathbf{R}_A и \mathbf{R}_B – их радиус-

векторы в системе центра масс квазимолекулы $BA^+ + e$). Последний член e^2/r добавлен в формулу (3.4), чтобы скомпенсировать кулоновский член, который был включен в гамильтониан H_e внешнего электрона.

Для вывода общего выражения для эффективного сечения $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(E)$ [$\text{см}^4 \cdot \text{с}$], захвата электрона на ридберговский уровень атома $A(nl)$ в тройном столкновении (3.2) воспользуемся общей формулой (1.16) для дифференциального сечения, $d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{\text{dir}}(E')/d\varepsilon$ [$\text{см}^2 \cdot \text{эрг}^{-1}$], обратного процесса прямой ионизации, сопровождаемой неадиабатическим переходом между двумя электронными термами $U_i(R)$ и $U_f(R)$ квазимолекулярного иона, BA^+ , временно образующегося при столкновении частиц A^+ and B (см. формулу (11) в [62]). Две указанные величины связаны друг с другом представленным ранее в Главе 1 соотношением детального баланса (1.13) между двумя взаимно обратными процессами. Подстановка выражения (1.16) в (1.13) дает следующую формулу для эффективного сечения захвата электрона в результате неадиабатического процесса (3.2):

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(E) = \tilde{g}_{\text{tr}} \frac{8\pi^5 \hbar}{q^2 k^2} \sum_J (2J+1) \times \sum_{l'm', m} \left| \left\langle \chi_{EJ}^{(i)}(R) \left| \mathbf{V}_{i, \varepsilon l' m'}^{f, nlm}(R) \right| \chi_{E'J}^{(f)}(R) \right\rangle \right|^2. \quad (3.5)$$

Здесь $E = \hbar^2 q^2 / 2\mu$, $E' = \hbar^2 (q')^2 / 2\mu = E + \varepsilon + |\varepsilon_{nl}|$ – кинетическая энергия сталкивающихся частиц A^+ и B в начальном и конечном канале реакции (3.2); $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ – энергия свободного электрона; $\varepsilon_{nl} = -Ry / (n - \delta_l)^2$ – энергия ридберговского электрона, δ_l – квантовый дефект атомного уровня nl . $\chi_{EJ}^{(i)}(R)$ и $\chi_{E'J}^{(f)}(R)$ – это радиальная волновая функция относительного движения ядер в начальном и конечном состояниях; J – орбитальный угловой момент импульса иона BA^+ . Величина \tilde{g}_{tr} определяется как $g_{\text{tr}}/\mathfrak{s}$, где $g_{\text{tr}} \equiv g_{BA^+(f)}/(g_{B(i)}g_{A^+(i)})$ есть отношение статистических весов. Наконец, \mathfrak{s} обозначает фактор симметрии, равный 2 для гомоядерных систем в случае, когда U_i или U_f является Σ -термом, а в противном случае равен 1.

Фигурирующий в формуле (3.5) $\mathbf{V}_{i, \varepsilon l' m'}^{f, nlm}(\mathbf{R})$ есть электронный матричный элемент свободно-связанного неадиабатического перехода

$$\mathbf{V}_{i, \varepsilon l' m'}^{f, nlm}(\mathbf{R}) = \langle \psi_{\varepsilon l' m'} | \langle \phi_i | \mathbf{V}(\mathbf{r}_\kappa, \mathbf{R}) | \phi_f \rangle | \psi_{nlm} \rangle,$$

где $\phi_i(\mathbf{r}_\kappa, \mathbf{R})$ и $\phi_f(\mathbf{r}_\kappa, \mathbf{R})$ – электронные волновые функции молекулярного иона, соответствующие $U_i(R)$ и $U_f(R)$ термам. $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ – волновая функция

ридберговского электрона, $\psi_{\varepsilon l' m'}(\mathbf{r}) \mathcal{R}_{\varepsilon l'}(r) Y_{l' m'}(\mathbf{n}_r)$, а $\mathcal{R}_{\varepsilon l'}(r)$ нормирована на $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$.

Электронный матричный элемент связан с шириной автоионизации квази-молекулы $\text{VA}(nl)$ соотношением

$$\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R) = \frac{2\pi}{2l+1} \sum_{m, m'} \left| \mathbf{V}_{i, \varepsilon l' m'}^{f, nlm}(R) \right|^2. \quad (3.6)$$

Далее приведем общую формулу для сечения, $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(vJ)$, диссоциативной рекомбинации молекулярного иона из заданного колебательно-вращательного уровня vJ , приводящего к образованию ридберговского атома $\text{A}(nl)$. Будем исходить из общего выражения [62] для парциального сечения, $\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{\text{ai}}(E'J)$, ассоциативной ионизации ридберговского атома $\text{A}(nl)$ при столкновении с атомом В и соотношения детального баланса:

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(vJ) = \frac{g_{\text{BA}^+(f)}(2l+1)q^2}{g_{\text{BA}^+(i)}(2J+1)k^2} \sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{\text{ai}}(E'J). \quad (3.7)$$

Окончательное выражение имеет вид:

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(vJ) = g_{\text{dr}} 4\pi^3 k^{-2} \times \sum_{l' m', m} \left| \left\langle \chi_{vJ}^{(i)}(R) \left| \mathbf{V}_{i, \varepsilon l' m'}^{f, nlm}(R) \right| \chi_{E'J}^{(f)}(R) \right\rangle \right|^2, \quad (3.8)$$

где $g_{\text{dr}} = g_{\text{BA}^+(f)} / g_{\text{BA}^+(i)}$.

3.3. Расчет эффективных сечений резонансного захвата электронов в рамках теории неадиабатических переходов

Для заданной частоты перехода $\omega = (\varepsilon + |\varepsilon_{nl}|) / \hbar$ акт резонансного захвата электрона (3.1) или (3.2) происходит в непосредственной окрестности точки пересечения R_ω кривых потенциальной энергии $U_{i, \varepsilon}(R) = U_i(R) + \varepsilon$ and $U_{f, nl}(R) = U_f(R) + \varepsilon_{nl}$ системы, $\text{VA}^+ + e$, состоящей из квази-молекулярного иона и внешнего электрона:

$$U_i(R_\omega) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = U_f(R_\omega) - \frac{Ry}{n_*^2}. \quad (3.9)$$

Таким образом, в точке пересечения, R_ω , энергия, $\hbar\omega = \varepsilon + |\varepsilon_{nl}|$, передаваемая от внешнего электрона при его свободно-связанном переходе, становится равной энергии расщепления $\Delta U_{fi}(R_\omega) = U_f(R_\omega) - U_i(R_\omega)$ электронных термов квази-молекулярного иона VA^+ (рис. 3.1).

3.3.1. Сечение трехчастичного захвата электронов атомарными ионами при столкновениях с нейтральными частицами

Сперва представим основные формулы, описывающие процесс резонансного трехчастичного захвата электронов атомарными ионами A^+ в результате свободно-свободных переходов ядер квазимолекулы $BA^+ + e$. С использованием выражения (3.6) для ширины автоионизации $\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R)$, а также квазиклассического приближения для матричных элементов неадиабатических переходов базовая формула (3.5) для сечения резонансного трехчастичного захвата может быть переписана в виде

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(E) = \tilde{g}_{tr}(2l+1) \frac{4\pi^4 \hbar}{q^2 k^2} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} R_\omega^2 \sum_J (2J+1) |\chi_{EJ}(R)|^2. \quad (3.10)$$

Здесь $\Delta F_{fi}(R_\omega)$ – разность наклонов этих кривых в точке пересечения R_ω :

$$\Delta F_{fi}(R_\omega) = \left| \frac{dU_f(R)}{dR} - \frac{dU_i(R)}{dR} \right|_{R=R_\omega}. \quad (3.11)$$

Для упрощения выкладок введем функцию распределения координат $W_E(R)$ [эрг⁻¹·см⁻³] для свободного движения ($E = \hbar^2 q^2 / 2\mu > 0$) тяжелых частиц A^+ и B , соответствующего кривой потенциальной энергии $U_i(R)$ иона BA^+ :

$$W_E(R) = \sum_{JM} |\psi_{EJM}(\mathbf{R})|^2 = \frac{1}{4\pi} \sum_J (2J+1) |\chi_{EJ}(R)|^2, \quad (3.12)$$

где $\psi_{EJM} = \chi_{EJ}(R) Y_{JM}(\theta, \varphi)$ – собственная волновая функция непрерывного спектра двухатомной системы с энергией E , орбитальным угловым моментом J и его z -проекцией M . С использованием функции распределения $W_E(R)$ выражение для сечения резонансного трехчастичного захвата (3.10) может быть переписано в виде

$$\sigma_{nl,\varepsilon}^{\text{tr}}(E) = \tilde{g}_{tr}(2l+1) \frac{16\pi^5 \hbar}{q^2 k^2} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon} R_\omega^2 W_E(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)}. \quad (3.13)$$

С использованием приближения JWKB для радиальной части ядерной волновой функции выражение для функции распределения ядер записывается следующим образом:

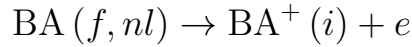
$$W_E(R) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar} \sum_J (2J+1) \frac{\cos^2 \Phi(R)}{R^2 V_{EJ}^{(i)}(R)} \rightarrow \frac{1}{4\pi^2 \hbar R^2} \int_0^{J_{\max}} \frac{2J dJ}{\sqrt{(2/\mu) [E - U(R) - \hbar^2 J^2 / 2\mu R^2]}}, \quad (3.14)$$

где максимальное значение J_{\max} орбитального углового момента в формуле (3.14) находится из условия $\hbar^2 J_{\max}^2 / 2\mu R^2 = E - U(R)$. Здесь было применено приближение для быстроосциллирующей функции $\cos^2(\dots) \rightarrow 1/2$, а также приближение квазинепрерывности, согласно которому в формуле (3.14) можно заменить суммирование по J на интегрирование: $\sum_J (2J + 1) \{\dots\} \rightarrow \int 2J dJ \{\dots\}$. Указанный теоретический подход в некоторой степени аналогичен использованному в работах [23, 161] подходу для описания радиационных свободно-свободных переходов.

Подставляя (3.14) в (3.13) и беря интеграл, получим окончательное выражение для эффективного сечения резонансного трехчастичного захвата в квазиклассическом приближении:

$$\sigma_{nl,\varepsilon}^{\text{tr}}(E) = \tilde{g}_{tr} (2l + 1) \frac{8\pi^3 R_\omega^2 \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)}{k^2 V_E \Delta F_{fi}(R_\omega)} \sqrt{1 - U_i(R_\omega)/E}. \quad (3.15)$$

Для более точного определения сечения $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(E)$ резонансной трехчастичерй рекомбинации (3.2), необходимо учитывать возможность обратного распада



из автоионизационного ридберговского состояния квазимолекулы. Известно, что в случае диссоциативной рекомбинации это может приводить к существенному уменьшению результирующих значений сечений, если главное квантовое число достаточно мало (см., например, [93, 162, 163]). В соответствии с общим способом учета процессов распада в рамках квазиклассического подхода [77, 115] сечение захвата (3.15) следует дополнительно умножить на так называемый фактор выживания S_{nl} . Для свободно-свободных переходов ядер введем зависящий от величины J фактор выживания $S_{nl}^{(J)}$ для каждой парциальной волны с орбитальным угловым моментом J . Тогда полное эффективное сечение трехчастичной рекомбинации $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(E)$ [см⁴·с] приобретает вид

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(E) = \tilde{g}_{tr} \frac{4\pi^4 \hbar}{q^2 k^2} (2l + 1) \frac{R_\omega^2 \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \sum_J (2J + 1) S_{nl}^{(J)} \left| \chi_{EJ}^{(i)}(R_\omega) \right|^2, \quad (3.16)$$

$$S_{nl}^J = \exp \left[- \int_{R_\omega}^{R_{\text{st}}} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R)}{\hbar} \frac{dR}{V_{E'J}^{(f)}(R)} \right], \quad (3.17)$$

где $V_{E'J}^{(f)}(R)$ – относительная скорость тяжелых частиц в конечном канале реакции:

$$V_{E'J}^{(f)}(R) = \sqrt{\frac{2}{\mu} [E' - U_f(R) - \hbar^2 J^2 / 2\mu R^2]}. \quad (3.18)$$

Верхний предел интегрирования в (3.17) – это так называемая точка стабилизации, за пределами которой (т.е. при $R > R_{\text{st}}$) обратная автоионизация становится невозможной при условии пренебрежения экспоненциально малым вкладом от подбарьерной области межъядерных расстояний. Она определяется из следующего уравнения

$$U_i(R_{\text{st}}) = U_f(R_{\text{st}}) - \frac{Ry}{n_*^2}. \quad (3.19)$$

При низких энергиях электрона $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e \rightarrow 0$ положения точек R_ω и R_{st} становятся близкими друг к другу, поэтому роль обратного автоионизационного распада оказывается небольшой.

Проведенные в диссертации расчеты показывают, что для рассматриваемых ридберговских квазимолекул $\text{VA}^+ + e$, состоящих из гетероядерного иона инертного газа и внешнего электрона, влияние автоионизационного распада невелико, так что в интересующем нас диапазоне энергий электронов и относительного движения ядер имеем $1 \geq \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(S_{nl}^J) / \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(S_{nl}^J \equiv 1) \geq 0.9$. Это позволяет либо пренебречь ролью автоионизации, либо заменить фактор выживания S_{nl}^J некоторую эффективную величину $S_{nl}^{\text{eff}} = \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(S_{nl}^J) / \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(S_{nl}^J \equiv 1)$. Всюду в приведенных ниже уравнениях полагается $S_{nl}^J = 1$.

3.3.2. Усредненные по больцмановскому распределению сечения диссоциативной рекомбинации

Теперь перейдем к рассмотрению и дальнейшему преобразованию выражения (3.8) для сечения диссоциативной рекомбинации молекулярного иона в начальном состоянии vJ . Для описания матричных элементов неадиабатических переходов будем применять квазиклассическое приближение. В этом случае выражение (3.8) приобретает вид

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(vJ) = \frac{2\pi^2 g_{\text{dr}} \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)}{k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} R_\omega^2 |\chi_{vJ}(R_\omega)|^2, \quad (3.20)$$

где $\Delta F_{fi}(R) = |F_f - F_i|$ – разница наклонов, $F_k = -dU_k/dR$ ($k = i, f$), потенциальных кривых электронных термов молекулярного иона VA^+ .

Вводя функцию распределения по координатам

$$W_{vJ}(R) = \frac{1}{2J+1} \sum_{M=-J}^J |\psi_{vJM}(\mathbf{R})|^2 = \frac{1}{4\pi} |\chi_{vJ}(R)|^2, \quad (3.21)$$

$$\int_0^\infty W_{vJ}(R) 4\pi R^2 dR = 1$$

для молекулярного иона с заданными колебательными, v , и вращательными, J , квантовыми числами, перепишем выражение (3.20) в следующем виде:

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(vJ) = \frac{2\pi^2 g_{\text{dr}}(2l+1) \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)}{k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} W_{vJ}(R_\omega) 4\pi R_\omega^2. \quad (3.22)$$

Усредненное по больцмановскому распределению сечение, $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(T)$ [см²], диссоциативной рекомбинации, соответствующее температуре газа T , определяется выражением

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(T) = (\mathfrak{s} Z_{\text{vr}})^{-1} \exp(-D_0/k_{\text{B}}T) \times \sum_{vJ} (2J+1) \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(vJ) \exp(-E_{vJ}/k_{\text{B}}T). \quad (3.23)$$

Здесь D_0 — энергия диссоциации молекулярного иона BA^+ (см. рис 3.1), а Z_{vr} — статистическая сумма колебательно-вращательных состояний молекулярного иона BA^+ :

$$Z_{\text{vr}}(T) = e^{-D_0/k_{\text{B}}T} \sum_{vJ} (2J+1) \exp\left(-\frac{E_{vJ}}{k_{\text{B}}T}\right). \quad (3.24)$$

В условиях, рассматриваемых в данной работе, суммирование в (3.23) по v и J можно заменить интегрированием по dv и dJ . Это соответствует приближению квазиконтинуума для колебательно-вращательных состояний ($E_{vJ} < 0$). Будем также использовать соотношение Бора-Зоммерфельда,

$$dv = T_{vJ} dE_{vJ} / (2\pi\hbar), \quad (3.25)$$

где T_{vJ} — это период колебательно-вращательного движения по классически разрешенной области межъядерных расстояний R :

$$T_{v(E)J} = 2 \int_{a_{v(E)J}^i}^{b_{v(E)J}^i} dR / [V_{v(E)J}(R)], \quad (3.26)$$

$$V_{v(E)J}(R) = \sqrt{(2/\mu) [E - U_i(R) - \hbar^2 J^2 / (2\mu R^2)]}.$$

Здесь $a_{v(E)J}^i$ и $b_{v(E)J}^i$ — левая и правая точки поворота, соответствующие кривой потенциальной энергии $U_i^{(J)}(R) = E$. С помощью формулы (3.25) заменим интегрирование по v на интегрирование по энергии в квазиконтинууме ($E_{vJ} < 0$):

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(T) = \frac{\exp(-D_0/k_{\text{B}}T)}{2\pi\hbar\mathfrak{s}Z_{\text{vr}}} \int_{E_{\text{min}}^{\text{dr}}}^0 dE_{vJ} \exp\left(-\frac{E_{vJ}}{k_{\text{B}}T}\right) \times \int_0^{J_{\text{max}}} T_{vJ} \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(vJ) 2J dJ. \quad (3.27)$$

Здесь в квазиклассическом приближении $E_{\text{min}}^{\text{dr}} = -D_0$.

Подставляя выражение (3.22) в (3.27), получим следующую формулу

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(T) = \frac{8\pi^2 \tilde{g}_{\text{dr}}}{\hbar k^2 Z_{\text{vr}} \Delta F_{fi}(R_{\omega})} \int_{-D_0}^0 dE \int_0^{J_{\text{max}}} J dJ e^{-\frac{E+D_0}{k_{\text{B}}T}} T_{v(E)J} \times \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon} W_{v(E)J} R_{\omega}^2. \quad (3.28)$$

Здесь $\tilde{g}_{\text{dr}} = g_{\text{dr}}/\mathfrak{s}$.

Радиальная волновая функция $\chi_{vJ}(R)$ колебательно-вращательного движения ядер в классически разрешенной области может быть описана с помощью приближения JWKB [115]:

$$\chi_{vJ}(R) = \frac{C_{vJ} \cos \Phi(R)}{R \sqrt{V_{vJ}(R)}}, \quad C_{vJ} = \frac{2}{\sqrt{T_{vJ}}},$$

$$\Phi(R) = \frac{1}{\hbar} \int_{a_1(vJ)}^R \mu V_{vJ}(R) dR - \frac{\pi}{4}, \quad (3.29)$$

так что (3.21) принимает вид

$$W_{v(E)J}(R) = \frac{(\pi)^{-1} \cos^2 \Phi(R)}{T_{v(E)J} R^2 V_{v(E)J}(R)}, \quad (3.30)$$

где $a_{v(E)J}^i \leq R \leq b_{v(E)J}^i$. Используя стандартное приближение $\langle \cos^2 \Phi(R) \rangle = 1/2$ для осциллирующей части функции $W_{v(E)J}(R)$, напишем выражение для усредненного по распределению Больцмана сечения диссоциативной рекомбинации в следующем виде:

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(T) = \frac{2\pi \tilde{g}_{\text{dr}}}{\hbar k^2 Z_{\text{vr}}(T) \Delta F_{fi}(R_{\omega})} \int_{-D_0}^0 dE \int_0^{J_{\text{max}}} 2J dJ e^{-\frac{E+D_0}{k_{\text{B}}T}} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_{\omega})}{V_{v(E)J}(R_{\omega})}. \quad (3.31)$$

Вычисляя двойной интеграл, получаем окончательную формулу для усредненного по Больцмановскому распределению сечения, $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(T)$ [см²], захвата электрона молекулярным ионом VA^+ на ридберговский уровень nl атома $\text{A}(nl)$, образующегося в процессе (3.1):

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(T) = \frac{8\pi^2 (2l+1) \tilde{g}_{\text{dr}} R_{\omega}^2 \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_{\omega})}{k^2 Z_{\text{vr}} \Delta F_{fi}(R_{\omega})} \times \left(\frac{\mu k_{\text{B}} T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{D_0 + U_i(R_{\omega})}{k_{\text{B}} T}\right) \Theta_T^{\text{dr}}(R_{\omega}), \quad (3.32)$$

Здесь Θ_T^{dr} — функция, характеризующая вклад квазиконтинуума связанных состояний vJ молекулярного иона VA^+ в резонансные неадиабатические переходы. В рамках используемого в данной работе квазиклассического приближения данная функция описывается формулой

$$\Theta_T^{\text{dr}}(R_{\omega}) = \begin{cases} 0 & (R_{\omega} < R_0), \\ \frac{\gamma(3/2, |U_i(R_{\omega})|/k_{\text{B}}T)}{\Gamma(3/2)} & (R_{\omega} \geq R_0), \end{cases} \quad (3.33)$$

где $\gamma(3/2, z) = \int_0^z t^{1/2} \exp(-t) dt$ — нижняя неполная гамма функция, а $\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}$.

3.4. Константы скорости резонансного захвата электронов в ридберговские состояния в двухтемпературной плазме

3.4.1. Резонансная тройная рекомбинация

Выражение для константы скорости $K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(T) = \langle V_E \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(E) \rangle_T$ [см⁵] трехчастичной электрон-ионной рекомбинации при заданных значениях энергии свободных электронов ε и температуры газа T имеет вид

$$K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(T) = \int_0^{\infty} dE f_T(E) V_E \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(E), \quad (3.34)$$

где $f_T(E)$ — функция распределения кинетической энергии $E = \mu V^2/2$ относительного движения сталкивающихся частиц A^+ и B . В случае максвелловского распределения, f_T , с учетом формулы (3.15) для сечения захвата константа

скорости (3.34) приобретает вид

$$K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(T) = \tilde{g}_{\text{tr}}(2l+1) \frac{8\pi^3 R_\omega^2 \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)}{k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{E_{\min}}^{\infty} \sqrt{\frac{E}{k_B T} - \frac{U_i(R)}{k_B T}} \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right) d\left(\frac{E}{k_B T}\right). \quad (3.35)$$

Здесь $E_{\min} = \max\{0, U_i(R_\omega)\}$. После взятия интеграла формулу (3.35) можно переписать следующим образом:

$$K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(T) = (2l+1) \tilde{g}_{\text{tr}} \frac{2\pi^2 4\pi R_\omega^2 \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)}{k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{k_B T}\right) \Theta_T^{\text{tr}}(R_\omega). \quad (3.36)$$

Безразмерный фактор $\Theta_T^{\text{tr}}(R_\omega)$ характеризует вклад непрерывного спектра квазиолекулярного иона BA^+ в резонансные неадиабатические переходы. В рамках квазиклассического приближения данный фактор описывается простой формулой

$$\Theta_T^{\text{tr}}(R_\omega) = \begin{cases} 1 & (R_\omega < R_0), \\ \frac{\Gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/kT)}{\Gamma(3/2)} & (R_\omega \geq R_0), \end{cases} \quad (3.37)$$

где $\Gamma(3/2, z) = \int_z^\infty t^{1/2} \exp(-t) dt$ – верхняя неполная гамма функция.

В случае двухтемпературной плазмы константа скорости,

$$\beta_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T) = \langle v_\varepsilon \langle V_E \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(E) \rangle \rangle [\text{cm}^6 \cdot \text{c}^{-1}],$$

процесса (3.2) резонансного трехчастичного захвата электрона вычисляется путем усреднения величины $v_\varepsilon K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(T)$ по распределению скоростей свободных электронов при заданной температуре T_e :

$$\beta_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T) = \langle v_\varepsilon K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(T) \rangle_{T_e} = \int_0^\infty d\varepsilon f_{T_e}(\varepsilon) v_\varepsilon K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(T). \quad (3.38)$$

Для максвелловского распределения $f_{T_e}(\varepsilon)$, выражение для константы скорости захвата $\beta_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T) = \langle v_\varepsilon \langle V_E \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{tr}}(E) \rangle_T \rangle_{T_e}$ приобретает вид:

$$\beta_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T) = \tilde{g}_{\text{tr}} \frac{(2l+1)}{g_{T_e}} \frac{1}{\hbar} \int_0^\infty \Gamma_{\varepsilon \rightarrow nl}(R_\omega) \frac{4\pi R_\omega^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{k_B T}\right) \Theta_T^{\text{tr}}(R_\omega) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T_e}\right) d\varepsilon, \quad (3.39)$$

где $g_{T_e} = \left(\frac{m_e k_B T_e}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$ – статистический вес единицы объема непрерывного спектра. Заменяя интегрирование по энергии свободных электронов ε на интегрирование по энергии перехода, $\hbar\omega$, имеем

$$\beta_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T) = \tilde{g}_{\text{tr}} \frac{2l+1}{g_{T_e}} e^{|\varepsilon_{nl}|/k_B T_e} \int_{|\varepsilon_{nl}|}^{\infty} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)}{\hbar} \Theta_T^{\text{tr}}(R_\omega) \times \exp\left(-\frac{\Delta U_{fi}(R_\omega)}{k_B T_e} - \frac{U_i(R_\omega)}{k_B T}\right) \frac{4\pi R_\omega^2 d(\hbar\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)}. \quad (3.40)$$

Здесь принято во внимание, что $\varepsilon = \Delta U_{fi}(R_\omega) - |\varepsilon_{nl}|$ (см. формулу (3.9)).

Выражение (3.40) удобно переписать в окончательном виде, заменив интегрирование по частоте перехода $d(\hbar\omega) = d[\Delta U_{fi}(R_\omega)] = \Delta F_{fi}(R_\omega) dR_\omega$ на интегрирование по межъядерному расстоянию dR . В результате получаем следующую формулу для константы скорости $\beta_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T)$ трехчастичного процесса резонансного захвата электрона

$$\beta_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T) = (2l+1) \tilde{g}_{\text{tr}} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e k_B T_e}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{|\varepsilon_{nl}|}{k_B T_e}\right) \times \int_0^{R_{nl}} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R)}{\hbar} \exp\left(-\frac{\Delta U_{fi}(R)}{k_B T_e}\right) \exp\left(-\frac{U_i(R)}{k_B T}\right) \Theta_T^{\text{tr}}(R) 4\pi R^2 dR. \quad (3.41)$$

Верхний предел интегрирования по R находится из соотношения $\Delta U_{fi}(R_{nl}) = |\varepsilon_{nl}|$.

3.4.2. Диссоциативная рекомбинация в условиях возбуждения всего колебательно-вращательного квазиконтинуума

С использованием (3.32) константа скорости диссоциативной рекомбинации, $\alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T)$ [$\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$], вычисляется в результате усреднения величины $v_\varepsilon \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(T)$ по функции распределения свободных электронов по скорости, $f_{T_e}(\varepsilon)$:

$$\alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T) = \int_0^\infty v_\varepsilon \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(T) f_{T_e}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.42)$$

В рамках используемого в данной работе квазиклассического приближения верхний предел интегрирования ∞ заменяется на величину ε_{max} , определяемую соотношением $|\varepsilon_{nl}| + \varepsilon_{\text{max}} = \Delta U_{fi}(R_0)$. Здесь межъядерное расстояние, R_0 , находится из соотношения $U_i(R_0) = 0$ (см. Рис. 3.1). Для максвелловского

распределения энергии электронов, $f_{T_e}(\varepsilon)$, формула для $\alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T)$ принимает вид:

$$\begin{aligned} \alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T) &= (2l+1) \tilde{g}_{\text{dr}} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e k_B T_e} \right)^{3/2} \\ &\times \frac{e^{-D_0/k_B T}}{Z(T)} \left(\frac{\mu k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\varepsilon_{\text{max}}} \frac{4\pi R_\omega^2 \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \\ &\times \exp \left[-\frac{U_i(R_\omega)}{kT} \right] \frac{\gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/k_B T)}{\Gamma(3/2)} \exp \left(-\frac{\varepsilon}{k_B T_e} \right) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Заменив интегрирование по энергии свободных электронов интегрированием по межъядерному расстоянию в молекулярном ионе $d\varepsilon = \Delta F_{fi}(R_\omega) dR_\omega$, получим окончательную формулу для константы скорости диссоциативной рекомбинации:

$$\begin{aligned} \alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T) &= (2l+1) \tilde{g}_{\text{dr}} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e k_B T_e} \right)^{3/2} \\ &\times \frac{e^{-D_0/k_B T}}{Z(T)} \left(\frac{\mu k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{R_0}^{R_{nl}} 4\pi R_\omega^2 \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega) \\ &\times \exp \left[-\frac{U_i(R_\omega)}{kT} \right] \frac{\gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/k_B T)}{\Gamma(3/2)} \exp \left(-\frac{\varepsilon}{k_B T_e} \right) dR_\omega. \end{aligned} \quad (3.44)$$

3.4.3. Суммарный вклад непрерывного и дискретного спектров в полную скорость резонансного захвата электрона

В практических расчетах часто представляют интерес абсолютные скорости захвата электронов в ридберговские состояния \mathfrak{W} [с⁻¹]. Эти скорости, очевидно, зависят от концентраций частиц в исходных каналах реакций. Для рассматриваемых здесь процессов (3.2) и (3.1), скорости реакций выражаются следующим образом

$$\mathfrak{W}_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T) = \beta_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T) N_B N_{A^+}, \quad (3.45)$$

$$\mathfrak{W}_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T) = \alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T) N_{\text{BA}^+}. \quad (3.46)$$

Полная скорость резонансного захвата электронов на атомный уровень nl определяется тогда как

$$\mathfrak{W}_{nl}^{\text{res}}(T_e, T) = \beta_{nl}^{\text{tr}} N_B N_{A^+} + \alpha_{nl}^{\text{dr}} N_{\text{BA}^+}. \quad (3.47)$$

Следует отметить, что когда молекулярные ионы BA^+ находятся в равновесии с частицами B и A^+ в непрерывном спектре, можно использовать закон

действующих масс для полной равновесной концентрации N_{BA^+} связанных молекулярных ионов в начальном электронном состоянии

$$\frac{N_{\text{BA}^+}}{N_{\text{B}}N_{\text{A}^+}} = \frac{Z_{\text{vr}}g_{\text{BA}^+}}{g_{\text{B}}g_{\text{A}^+}} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{\mu k_{\text{B}}T} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{D_0}{k_{\text{B}}T} \right). \quad (3.48)$$

Тогда можно переписать выражение (3.46) в виде

$$\begin{aligned} \mathfrak{W}_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T) &= \alpha_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T) N_{\text{B}}N_{\text{A}^+} \tilde{g}_{\text{tr}} Z_{\text{vr}} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{\mu k_{\text{B}}T} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{D_0}{k_{\text{B}}T} \right) \\ &\equiv \beta_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T) N_{\text{B}}N_{\text{A}^+}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Здесь введена константа скорости $\beta_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T)$ [$\text{см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$] диссоциативной рекомбинации, нормированная на произведение концентраций атомных ионов и нейтральных атомов. Для расчета колебательно-вращательной статистической суммы, Z_{vr} , используем квазиклассическую формулу, полученную в [164]:

$$\begin{aligned} Z_{\text{vr}}(T) &= \frac{1}{\mathfrak{s}} \left(\frac{\mu k_{\text{B}}T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} e^{-D_0/k_{\text{B}}T} \\ &\times \int_{R_0}^{\infty} \left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{3}{2}, \frac{|U_i(R)|}{k_{\text{B}}T} \right) \right] e^{-\frac{U_i(R)}{k_{\text{B}}T}} 4\pi R^2 dR \end{aligned} \quad (3.50)$$

Как и представленный выше подход, формула (3.50) применима, когда $k_{\text{B}}T \gtrsim \hbar\omega_e$.

Используя (3.49), получаем простое выражение для полной константы скорости, $\beta_{nl}^{\text{res}} = \mathfrak{W}_{nl}^{\text{res}} / (N_{\text{B}}N_{\text{A}^+})$, резонансного захвата электронов

$$\beta_{nl}^{\text{res}} = \beta_{nl}^{\text{tr}} + \beta_{nl}^{\text{dr}}. \quad (3.51)$$

Константа скорости β_{nl}^{res} в явном виде включает в себя вклады тройной (3.2) и диссоциативной (3.1) рекомбинации. Это делает использование величины (3.51) особенно удобным для выяснения сравнительной роли резонансных и нерезонансных механизмов заселения ридберговских уровней. При использовании квазиклассического приближения и учете движения ядер лишь по классически разрешенной области выражение для β_{nl}^{res} может быть дополнительно упрощено. Учитывая, что в квазиклассическом случае $\Theta_T^{\text{tr}}(R) + \Theta_T^{\text{dr}}(R) = 1$ и используя формулы (3.41) и (3.44), получаем выражение для β_{nl}^{res} в виде:

$$\begin{aligned} \beta_{nl}^{\text{res}}(T_e, T) &= (2l+1) \tilde{g}_{\text{tr}} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e k_{\text{B}}T_e} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{|\varepsilon_{nl}|}{k_{\text{B}}T_e} \right) \\ &\times \int_0^{R_{nl}} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R)}{\hbar} \exp\left(-\frac{\Delta U_{fi}(R)}{k_{\text{B}}T_e} \right) \exp\left(-\frac{U_i(R)}{k_{\text{B}}T} \right) 4\pi R^2 dR. \end{aligned} \quad (3.52)$$

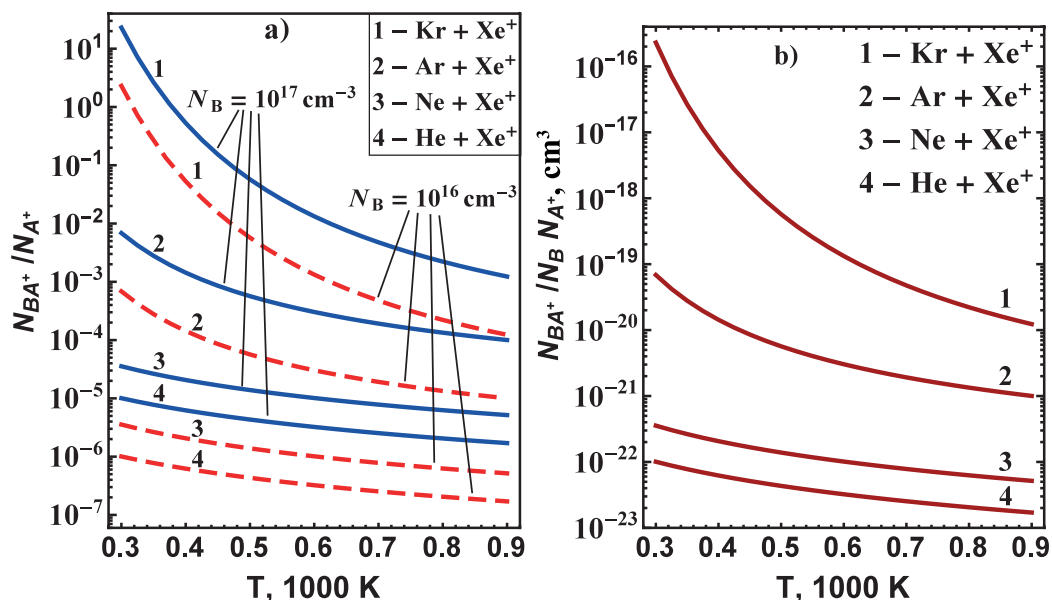


Рис. 3.2: Температурные зависимости относительных концентраций N_{BA^+}/N_{A^+} (a) и $N_{BA^+}/N_B N_{A^+}$ (b) для систем Kr+Xe⁺ (кривые 1), Ar+Xe⁺ (кривые 2), Ne+Xe⁺ (кривые 3), He+Xe⁺ (кривые 4). Расчеты величин N_{BA^+}/N_{A^+} были осуществлены для концентраций атомов буферного газа $N_B = 10^{17}$ (сплошные синие кривые) and $N_B = 10^{16}$ (красные пунктирные кривые).

В диссертации в основном ведутся расчеты констант скоростей, нормированных на произведение концентраций N_B и N_{A^+} . Однако, в случае теплового равновесия тяжелых частиц соотношение (3.48) позволяет вместо этого использовать концентрации молекулярных ионов N_{BA^+} . Главным фактором, определяющим выбор нормировки, является при этом отношение энергии диссоциации D_0 к величине $k_B T$ (см. рис. 3.2). Для относительно больших значений D_0 (как KrXe⁺ или ArXe⁺) или низких T , молекулярные ионы находятся преимущественно в связанном состоянии, так что естественно нормировать константы скорости на N_{BA^+} . Напротив, для слабосвязанных ионов (как HeXe⁺ или NeXe⁺) или при достаточно высоких T , роль непрерывного спектра возрастает и наиболее естественно использовать принятый здесь тип нормировки. В реальных экспериментах функции распределения молекулярных ионов по колебательно-вращательным уровням и распределения относительных скоростей частиц могут существенно отличаться от равновесных. Поэтому выбор способа нормировки должен производиться в зависимости от конкретных физических условий.

В случае электрон-ионной рекомбинации с участием ридберговских атомов в конечном канале реакции интерес представляют сечения и константы скоростей, просуммированные по всем значениям lm уровня с главным квантовым

числом n :

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow n} = \sum_{l=0}^{n-1} \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}, \quad \alpha_n^{\text{dr}} = \sum_{l=0}^{n-1} \alpha_{nl}^{\text{dr}}, \quad \beta_n^{\text{tr}} = \sum_{l=0}^{n-1} \beta_{nl}^{\text{tr}}, \quad \beta_n^{\text{res}} = \sum_{l=0}^{n-1} \beta_{nl}^{\text{res}}. \quad (3.53)$$

В соответствии с формулами (3.16), (3.32) и (3.52) сечения, $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}$, и константы скорости, β_{nl} , резонансного захвата электрона на уровни nl существенно зависят от значений ширины, $\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}$, автоионизации ридберговских квазимолекул $\text{VA}(f, nl)$. Чтобы вычислить сечения и константы скорости, определяемые формулой (3.53), следует заменить значение $(2l+1)\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}$ во всех конечных выражениях для сечений и констант скоростей захвата на эффективный параметр связи

$$\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \rightarrow n}(R_\omega) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega) = 2\pi \sum_{ml, m'l'} \left| V_{i, \varepsilon l' m'}^{f, nlm}(R_\omega) \right|^2. \quad (3.54)$$

описывающий суммарный вклад отдельных nl -уровней в захват электронов во все nlm -состояния с главным квантовым числом n . Его конкретный вид зависит от типа рассматриваемой квазимолекулярной системы и от симметрии электронных термов, $U_i(R)$ и $U_f(R)$, участвующих в исследуемых неадиабатических переходах. Отметим, что для неводородоподобных состояний атомов со значительными квантовыми дефектами δ_l значения R_ω для каждого члена суммы по l отличаются друг от друга из-за зависимости величин δ_l от орбитального углового момента. Поэтому расчеты суммарных сечений и констант скоростей захвата электрона (3.53) при заданном значении n должны, вообще говоря, осуществляться путем прямого суммирования отдельно рассчитанных вкладов, соответствующих различным значениям l .

3.5. Ширины автоионизационного распада ридберговских состояний квазимолекулы

Для вычисления автоионизационных ширин ридберговских состояний, $\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}$, и эффективных констант связи, $\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \rightarrow n}(R_\omega)$, в рассматриваемом случае гетероядерных молекулярных систем RgXe^+ (где $\text{Rg} = \text{Ne}(2s^2 2p^6 {}^1S_0)$, $\text{Ar}(3s^2 3p^6 {}^1S_0)$, $\text{Kr}(4s^2 4p^6 {}^1S_0)$) используется слегка модифицированная вакансионная модель [14, 62]. В данной модели учтено, что в исследуемых процессах рекомбинации (3.1) и (3.2) свободно-связанные переходы внешнего электрона системы $\text{RgXe}^+ + e$ обусловлены переходом $X |j_i = 3/2, \Omega_i = 1/2\rangle \rightarrow A_1 |j_f = 3/2, \Omega_f = 3/2\rangle$

между основным, $U_i(R)$, и первым возбужденным, $U_f(R)$, электронными термами гетероядерного иона RgXe^+ (см. рис. 3.1). Модель сводит взаимодействие внешнего электрона со всеми внутренними электронами молекулярного иона к взаимодействию, $V = -e^2/|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_v|$, ридберговского электрона (\mathbf{r}_e) с положительно заряженной одноэлектронной вакансией (\mathbf{r}_v) в электронной оболочке атомарного иона $\text{Xe}^+(5s^25p^5^2P_{3/2})$, описываемой радиальной волновой функцией $\mathcal{R}_{5p}(r_v)$. Взаимодействием ридберговского электрона с электронами замкнутой электронной оболочки атома $\text{Rg}(^1S_0)$ можно в первом приближении пренебречь. Полученное выражение для эффективного параметра связи (3.54) имеет вид:

$$\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \rightarrow n} = \frac{4\pi}{25} \sum_{l'} \frac{\gamma_{ll'}}{n_*^3}, \quad \gamma_{ll'} = C_{ll'} Q_{ll'}^2 \quad (3.55)$$

Угловые коэффициенты $C_{ll'}$ и радиальные интегралы $Q_{ll'}$ в (3.55) имеют вид

$$\begin{aligned} C_{ll'} &= (2l+1)(2l'+1) \begin{pmatrix} l & 2 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \\ &\sum_m \begin{pmatrix} l & 2 & l' \\ -m & -1 & m+1 \end{pmatrix}^2, \quad Q_{ll'}^2 = n_*^3 I_{\varepsilon l' \rightarrow nl}^2, \\ I_{\varepsilon l' \rightarrow nl} &= \int_0^\infty r_v^2 dr_v \mathcal{R}_{5p}^2(r_v) \left\{ \int_0^{r_v} \frac{r_e^2}{r_v^3} \mathcal{R}_{\varepsilon l'}^*(r_e) \mathcal{R}_{nl}(r_e) r_e^2 dr_e \right. \\ &\left. + \int_{r_v}^\infty r_v^2 dr_v \mathcal{R}_{5p}^2(r_v) \int_0^{r_v} \frac{r_v^2}{r_e^3} \mathcal{R}_{\varepsilon l'}^*(r_e) \mathcal{R}_{nl}(r_e) r_e^2 dr_e \right\}. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Здесь $n_* = n - \delta_l$ – эффективное главное квантовое число, δ_l – квантовый дефект nl -уровня. Метод вычисления величин $\gamma_{ll'}$ изложен в работах [14, 62] за исключением того, что волновые функции ридберговских состояний со значительным квантовым дефектом рассчитывались с использованием численных процедур, описанных в [165]. Отметим, что в приближении первого порядка зависимостью величин $\gamma_{ll'}$ от R можно пренебречь.

Для расчета автоионизационной ширины, $\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}$, ридберговских состояний квазимолекулы $A_2(f, nl)$ в случае гомоядерных систем можно ограничиться дипольным членом $V = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{d}(\mathbf{r}_\kappa, \mathbf{R})/r^3$ в потенциале взаимодействия [93, 163,

166]. Это дает

$$\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R) = \frac{2\pi m_e^2 \omega^4}{3e^2} |d_{fi}(R_\omega)|^2 \mathfrak{R}_{nl \rightarrow \varepsilon}, \quad (3.57)$$

$$\begin{aligned} \mathfrak{R}_{nl \rightarrow \varepsilon} &= \frac{1}{2l+1} \sum_{l'm', m} |\langle \varepsilon l' m' | \mathbf{r} | nlm \rangle|^2 = \\ &= \frac{l}{2l+1} |\langle \varepsilon, l-1 | r | nl \rangle|^2 + \frac{l+1}{2l+1} |\langle \varepsilon, l+1 | r | nl \rangle|^2. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Здесь $\mathbf{d}_{fi}(R) = \langle \phi_i^{\text{BA}^+} | \mathbf{d}(\mathbf{r}_\kappa, \mathbf{R}) | \phi_f^{\text{BA}^+} \rangle$ – дипольный матричный элемент электронного перехода $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ между термами молекулярного иона A_2^+ . Для заданной энергии $\hbar\omega = \Delta U_{fi}(R_\omega)$ неадиабатического перехода можно выразить $d_{fi}(R)$ через силу осциллятора:

$$\mathbf{f}_{fi}(R_\omega) = \frac{2m_e \omega}{3\hbar e^2} |d_{fi}(R_\omega)|^2. \quad (3.59)$$

Величина $\langle \varepsilon, l \pm 1 | r | nl \rangle = \langle \mathcal{R}_{\varepsilon, l \pm 1} | r | \mathcal{R}_{nl} \rangle$ обозначает матричный элемент перехода электронной координаты по кулоновским волновым функциям. В квазиклассическом приближении он имеет вид [167]

$$\begin{aligned} \langle \varepsilon, l \pm 1 | r | nl \rangle &= -\frac{(l+1/2)^2}{\pi\sqrt{3m_e n_*}^{3/2} \omega} [K_{2/3}(u) \mp K_{1/3}(u)], \\ u &= \frac{\hbar\omega(l+1/2)^3}{6Ry}, \quad \hbar\omega = \frac{Ry}{n_*^2} + \varepsilon. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Здесь $K_\nu(u)$ – функции Макдональда. Подставляя выражение (3.60) в (3.58), имеем

$$\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega) = \frac{\hbar\omega(l+1/2)^4}{3\pi n_*^3} \mathbf{f}_{fi}(R_\omega) \times [K_{2/3}^2(u) + K_{1/3}^2(u)]. \quad (3.61)$$

Суммирование величин $(2l+1)\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)$ по l позволяет вычислить эффективный параметр связи $\tilde{G}_{\varepsilon \rightarrow n}$, определяющий сечения и константы скоростей исследуемых процессов в случае гомонуклеарных систем. Отметим, что в каждом члене суммирования по l величина R_ω различная, так как R_ω зависит от эффективного квантового числа. В случае водородоподобных атомов, когда $n_* = n$ и R_ω не зависит от l , окончательное квазиклассическое выражение для $\tilde{G}_{\varepsilon \rightarrow n}(R_\omega)$ (см. (3.54)) приобретает вид:

$$\tilde{G}_{\varepsilon \rightarrow n}(R_\omega) = \frac{8Ry G_{n \rightarrow \varepsilon}}{3\sqrt{3} n^3} \left| \frac{d_{fi}(R_\omega)}{ea_0} \right|^2. \quad (3.62)$$

Здесь $G_{n \rightarrow \varepsilon}$ – фактор Гаунта (см., например, [16]). Известно, что при $n \gg 1$ простое аналитическое приближение Крамерса, согласно которому $G_{n \rightarrow \varepsilon} = 1$, дает

хорошее согласие с точным квантовым результатом. Использование выражения (3.62) оправдано при захвате на уровни с большими n , когда вкладом членов $(2l + 1) G_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)$ с низкими l и большими квантовыми дефектами δ_l можно пренебречь. В остальных случаях необходимо провести прямое суммирование (3.53) с помощью формулы (3.61).

3.6. Результаты и обсуждение

Ниже приведены результаты расчетов и анализа поведения сечений и констант скоростей исследуемых резонансных рекомбинационных процессов. Рассмотрение проведено для плазмы смесей инертных газов Rg/Xe при электронных и газовых температурах, типичных для газоразрядных экспериментов. Учтена сложная структура ридберговских уровней ксенона и особенности электронных термов гетероядерных ионов инертных газов RgXe^+ . Электронная конфигурация иона Xe^+ , $5p^5$, приводит к сильному спин-орбитальному расщеплению, $\Delta_{3/2,1/2} = 1.3 \text{ eV}$, электронных термов, сходящихся к состояниям $^2P_{3/2}$ и $^2P_{1/2}$. Поэтому высоколежащие термы, коррелирующие с $^2P_{1/2}$, могут быть исключены из расчетов, а рассмотрены будут только неадиабатические переходы между нижними термами $X(3/2, 3/2)$ и $A_1(3/2, 1/2)$ иона RgXe^+ (см. Рис. 3.1).

Ридберговские состояния атома $\text{Xe}[5p^5(^2P_j)nl[K]_{\mathcal{J}}]$ характеризуются набором квантовых чисел n, l, K и J , где K – квантовое число углового момента $\mathbf{K} = \mathbf{j} + \mathbf{l}$, а $\mathcal{J} = K \pm 1/2$ и $j = 3/2, 1/2$ – полный момент ридберговского атома и атомного остатка, соответственно [168]. У подуровней nl -состояний при $l = 0, 1, 2$ большие квантовые дефекты $\delta_{nl[K]_{\mathcal{J}}}$, в то время как ридберговские подуровни $nl[K]_{\mathcal{J}}$ с $l \geq 3$ имеют почти водородоподобную структуру [169]. Квантовые дефекты играют особенно важную роль при переходах на уровни $n \lesssim 10$.

Структуру низколежащих ридберговских уровней Xe можно приближенно учесть, введя эффективное главное квантовое число $n_* = n - \delta_{nl}^{\text{eff}}$. Здесь δ_{nl}^{eff} есть эффективный квантовый дефект, полученный усреднением по набору квантовых дефектов $\delta_{nl[K]_{\mathcal{J}}}$. Такое приближение правомерно, так как $|\delta_{nl}^{\text{eff}} - \delta_{nl[K]_{\mathcal{J}}}| \ll \delta_{nl}^{\text{eff}}$ для $l = 0, 1, 2$. Более детальный подход подразумевает точный учет статистических весов состояний $nl[K]_{\mathcal{J}}$ в выражениях для сечений резонансного захвата, а также проведение численных расчетов с использованием спектроскопических данных по ридберговским состояниям Xe.

3.6.1. Зависимости эффективных сечений резонансного захвата электрона от главного квантового числа

На рисунке 3.3 представлены графики зависимости сечений резонансного захвата $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{tr}}$ от главного квантового числа n для столкновительных систем $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$. Расчеты были проведены для энергий электронов и тяжелых частиц, соответствующих максимумам функций распределения Максвелла ($\varepsilon = k_{\text{B}}T_e/2$ и $E = k_{\text{B}}T/2$) при электронной температуре $T_e=2000$ К и газовых температурах $T=300, 600$ и 900 К. Из рис. 3.3 видно одинаковое поведение сечений для обеих систем: имеется ярко выраженный максимум, определяющий область уровней n , на которые происходит преимущественное заселение. Ключевой фактор, определяющий положение максимума n_{max} , состоит в том, что неадиабатические переходы, сопровождающиеся захватом на n_{max} , происходят вблизи положения равновесия R_e нижнего терма молекулярного иона VA^+ . Максимумы расположены вблизи $n^{\text{max}} \approx 10$ для $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ и $n^{\text{max}} \sim 20 - 35$ для $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$; значения n^{max} столь существенно отличаются из-за разницы в энергиях диссоциации катионов. Из рис. 3.3 также видно, что сечения захвата в случае $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ резко убывают с уменьшением n при $n < n^{\text{max}}$, что обусловлено тем фактом, что при низких n точка резонансного перехода R_n попадает в классически запрещенную область.

В случае системы $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ положение максимума почти не зависит от энергии столкновения, в то время как для $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ наблюдается заметный сдвиг n^{max} в сторону меньших n при увеличении E . Подобное различие вызвано тем, что в системах со сравнительно высокими значениями D_0 точка резонансного перехода R_ω , соответствующая низким n , обычно лежит вблизи положения равновесия R_e нижнего терма, за счет чего становятся допустимыми переходы даже при низких E . Если же значение D_0 низко, то захваты на низкие n происходят при $R_\omega \lesssim R_e$, в отталкивающей части терма, так что низкие E классически недопустимы.

На рис. 3.4 представлены рассчитанные по (3.32) усредненные по распределению Больцмана сечения диссоциативного захвата электронов на уровни n при столкновениях с ArXe^+ (рис. 3.4а) и NeXe^+ (рис. 3.4б) при $T = 500$ К. Энергия электронов взята равной $\varepsilon = k_{\text{B}}T_e/2$, что соответствует максимуму распределения Максвелла, а T_e изменяется в пределах от 500 К до 1500 К. Из рисунка видно, что сечения падают с ростом электронной температуры. Подобно сечени-

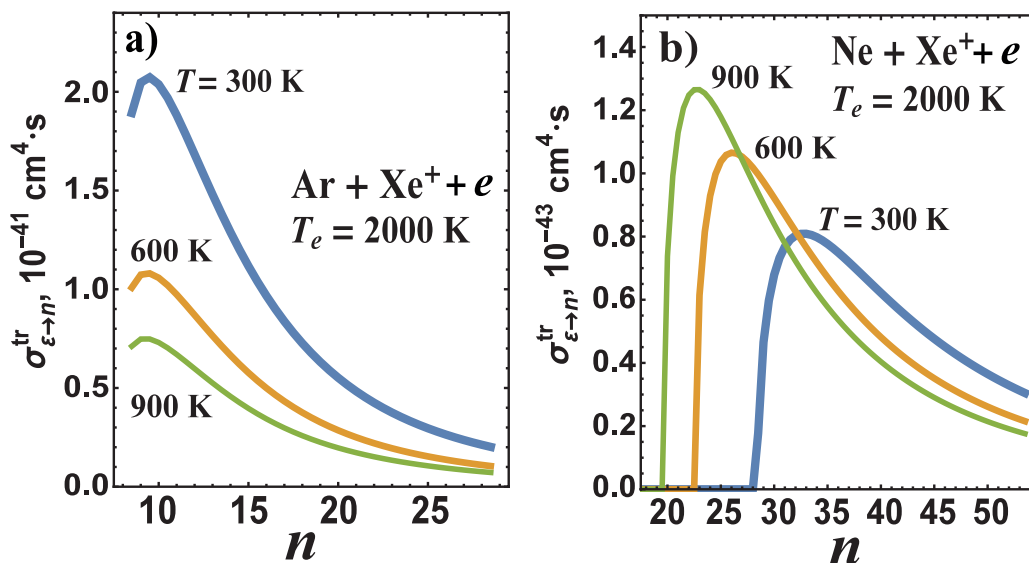


Рис. 3.3: Сечения $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{tr}}(E)$ [$\text{cm}^4 \cdot \text{s}$] резонансного трехчастичного захвата (3.2) на все lm -подуровни ридберговского уровня n (см. (3.16)) для систем $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ (а) и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ (б). Расчеты проведены для энергий $\varepsilon = k_{\text{B}}T_e/2$ и $E = k_{\text{B}}T/2$ при $T_e = 2000 \text{ K}$ и $T = 300, 600$ и 900 K .

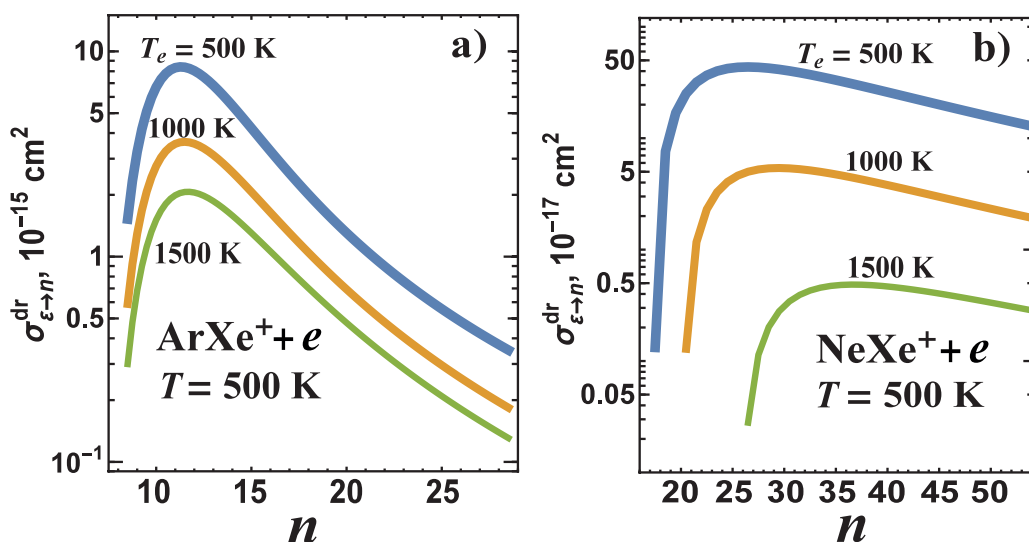


Рис. 3.4: Усредненные по распределению Больцмана ($T = 500 \text{ K}$) сечения диссоциативного захвата, $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{dr}}(T)$ [cm^2] (см. (3.32)) на все lm -подуровни ридберговского уровня n для молекулярных ионов ArXe^+ (а) и NeXe^+ (б). Расчеты проведены при различных значениях энергии электронов, $\varepsilon = k_{\text{B}}T_e/2$, указанных возле соответствующих кривых.

ям резонансного трехчастичного захвата, величины $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(T)$ имеют максимум в зависимости по n , смещающийся в сторону низких уровней при увеличении энергии диссоциации. Положение максимума определяется из условия $R_\omega \approx R_e$, или, иначе говоря $\Delta U_{fi}(R_\omega) = \varepsilon + |\varepsilon_{n^{\text{max}}}| \approx \Delta U_{fi}(R_e)$. В случае ArXe^+ максимум расположен вблизи $n^{\text{max}} \approx 12$, и n^{max} почти не зависит от T_e . Для слабосвязанной системы NeXe^+ максимум лежит в диапазоне $n > 20$ и быстро смещается в сторону высоких n с ростом T_e .

Необходимо отметить, что прямое сравнение эффективных сечений $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{tr}}$ и $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{dr}}(T)$ невозможно из-за разных размерностей ($[\text{см}^4 \cdot \text{с}]$ и $[\text{см}^2]$). Тем не менее, из качественного анализа представленных в данном разделе результатов следует, что в слабосвязанных системах (в рассматриваемом случае NeXe^+) преобладает резонансный процесс трехчастичного захвата (3.2). Напротив, в системах с большими D_0 , как ArXe^+ или, например, KrXe^+ , доминирует вклад от диссоциативной рекомбинации. Численное сравнение эффективности двух данных процессов с помощью расчета констант скоростей захвата будет представлено в следующих разделах.

3.6.2. Константы скорости резонансного захвата в зависимости от главного квантового числа и температур T и T_e

На рис. 3.5 представлены зависимости от n констант скорости резонансного захвата электронов в ридберговские n -состояния, $\beta_n^{\text{res}} = \beta_n^{\text{tr}} + \beta_n^{\text{dr}}$, за счет процессов диссоциативной и трехчастичной рекомбинации. Расчеты проведены для сталкивающихся систем $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ при электронных температурах $T_e = (1 \div 3) \times 10^3$ К и газовых температурах $T = 400$ К и 800 К. Подобный выбор систем и температур позволяет исследовать свойства β_n^{res} как в случае слабосвязанных ионов ($D_0 \lesssim k_B T$; здесь это NeXe^+ с $D_0 = 33$ мэВ), так и умеренно- и сильносвязанных ионов ($D_0 \gg k_B T$; здесь это ArXe^+ с $D_0 = 176$ мэВ). Из рис. 3.5 видно, что величины констант скоростей для рассматриваемых систем значительно различаются: значения β_n^{res} в максимуме для $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ на 2-3 порядка выше, чем значения β_n^{res} в максимуме для $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$. Столь существенное различие обусловлено тем, что в системах с большими энергиями диссоциации (таких, как $\text{Ar} + \text{Xe}^+$ или $\text{Kr} + \text{Xe}^+$) гораздо выше вероятность образования квазимолекулярных ионов VA^+ , играющих ключевую роль в процессах диссоциативной рекомбинации. Таким образом, в большинстве случаев в условиях квазиравновесности эффективность резонансного процесса захвата

оказывается выше для систем с более высокими значениями энергии диссоциации D_0 .

Из рис. 3.5 следует качественно различное поведение констант скоростей захвата $\beta_n^{\text{res}}(T_e, T)$ для систем с большими и малыми энергиями диссоциации ($\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$, соответственно). В случае системы $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ наблюдается острый максимум по n при $n_{\text{max}} \approx 11$. В случае систем с умеренноглубокими термами положение n_{max} определяется из условия, что захваты происходят вблизи положения равновесия нижнего терма, то есть $R_{n_{\text{max}}} \approx R_e$. По этой причине значение n_{max} почти не зависит от газовых T и электронных температур T_e . Данное поведение находится в полном соответствии с результатами из рис. 3.3а, 3.4а. При этом величина $\beta_n^{\text{res}}(T_e, T)$ убывает на один порядок при увеличении T с 400 до 800 К. Столь быстрое падение обусловлено экспоненциальным уменьшением вероятности формирования связанных молекулярных ионов ArXe^+ , играющих ключевую роль в доминирующем процессе диссоциативной рекомбинации.

Совершенно иначе ведут себя константы скоростей захвата $\beta_n^{\text{res}}(T_e, T)$ в зависимости от n и T в случае систем с малыми энергиями диссоциации D_0 (в данном случае NeXe^+). Как видно из рис. 3.5b, для данных систем преобладает захват на высоковозбужденные уровни ($n_{\text{max}} \approx 20$ для $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$), в то время как заселение нижних уровней оказывается пренебрежимо малым. При этом при увеличении газовой температуры максимальное значение константы скорости захвата почти не меняется, а рабочая область захвата смещается в сторону более низких состояний n ($n_{\text{max}} \approx 15$ при $T = 800$ К), в полном соответствии с результатами, представленными на рис. 3.3b – 3.4b. Подобное поведение связано с тем фактом, что в случае систем с малыми энергиями диссоциации D_0 доминирует резонансный процесс трехчастичного захвата ($\beta_n^{\text{tr}} \gg \beta_n^{\text{dr}}$), и неадиабатические переходы происходят преимущественно в оттакливающей части терма $R < R_0$ (см. рис. 3.1). Увеличение газовой температуры T приводит к тому, что возрастает вероятность переходов на малых межъядерных расстояниях R , сопровождающихся заселением низких уровней. Данное поведение находится в полном соответствии с результатами для сечений захвата, представленными на рис. 3.3b.

Из сравнения рисунков 3.5а и 3.5b виден одинаковый характер зависимости $\beta_n^{\text{res}}(T_e, T)$ от T_e для обеих систем — вероятность электронного захвата падает с ростом электронной температуры. Увеличение T_e в 3 раза приводит примерно к

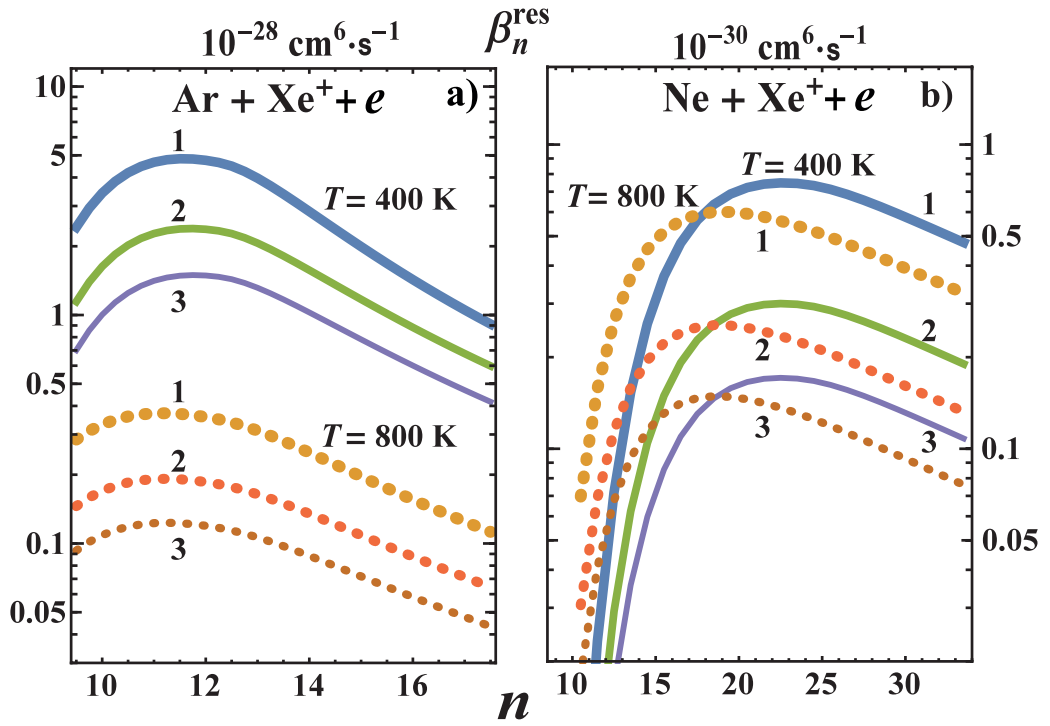


Рис. 3.5: Полные константы скорости резонансного захвата, $\beta_n^{\text{res}}(T, T_e) \equiv \beta_n^{\text{res}} = \beta_n^{\text{tr}} + \beta_n^{\text{dr}}$, электронов на все lm -подуровни уровня n для систем $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ (a) и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ (b). Расчеты проведены для газовых температур $T = 400$ К (сплошные кривые) и 800 К (пунктирные кривые) и электронных температур $T_e = 1000$ К (кривые 1), 2000 К (кривые 2), и 3000 К (кривые 3).

четырежды уменьшению $\beta_n^{\text{res}}(T_e, T)$. Данное поведение легко объяснимо с помощью рис. 3.1: с ростом электронной температуры растет средняя энергия свободных электронов, за счет чего точка перехода R_ω смещается в области $R \lesssim R_e$, в которых падает вероятность нахождения молекулярных ионов.

3.6.3. Анализ эффективностей резонансных процессов диссоциативного и трехчастичного захвата электронов

На рис. 3.6 показано сравнение вкладов от процессов трехчастичного захвата (3.2) и диссоциативной рекомбинации (3.1) в полную константу скорости захвата β_n^{res} . Из рисунка следует, что относительный вклад процесса трехчастичного захвата возрастает при уменьшении энергии диссоциации D_0 , за счет более высокой вероятности нахождения системы VA^+ в непрерывном начальном состоянии. По этой же причине относительная эффективность резонансного трехчастичного захвата тем выше, чем газовая температура T . Из рисунка видно, что в случае ArXe^+ доля процесса (3.2) не превышает 50% даже $T = 900$ К, в то время как в случае NeXe^+ данный процесс является доминирующим даже при $T = 300$ К.

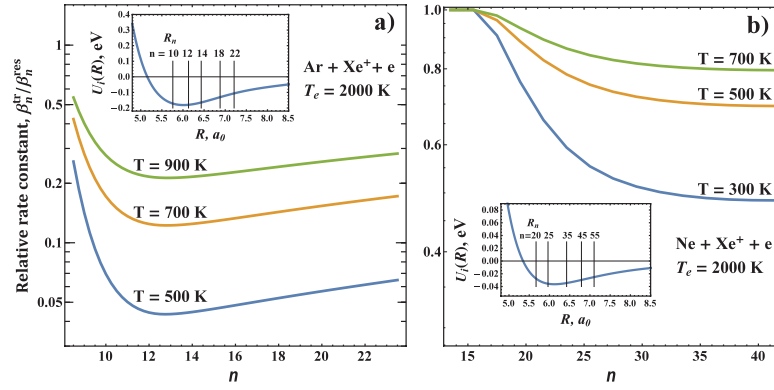


Рис. 3.6: Относительный вклад, $\beta_n^{\text{tr}}/\beta_n^{\text{res}}$, трехчастичного процесса (3.2) электронного захвата в полную константу скорости, $\beta_n^{\text{res}} = \beta_n^{\text{tr}} + \beta_n^{\text{dr}}$, резонансного захвата на все lm -полуровни уровня n , также включающую вклад диссоциативной рекомбинации (3.1) со всех колебательно-вращательных уровней молекулярного иона. Расчеты проведены для систем $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ (рис. а) и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ (рис. б) при электронной температуре $T_e = 2000$ К и различных газовых температурах T .

На вставках к рисункам 3.6а и 3.6б показаны нижние термы квазимолекулярных ионов VA^+ и отмечены различные точки резонансных переходов R_n . Из сравнения вставок с основными графиками видно, что форма кривых $\beta_n^{\text{tr}}/\beta_n^{\text{res}}$ соотносится с формой нижних термов: минимум эффективности трехчастичного захвата приходится на те уровни n_{min} , захват на которые происходит вблизи положения равновесия молекулярного иона, т.е. $R_{n_{\text{min}}} \approx R_e$. Отсюда можно сделать вывод, что заселение и наиболее низких, и высоковозбужденных уровней $n \gtrsim 20$ осуществляется преимущественно за счет резонансного трехчастичного захвата, поскольку происходит на межъядерных расстояниях R_n , сильно отличных от R_e .

Важно отметить, что представленные выше результаты сравнительного анализа резонансных процессов трехчастичного захвата и диссоциативной рекомбинации получены при Максвелловских распределениях скоростей. Однако, в зависимости от специфики проводимого эксперимента, распределения скоростей могут быть не-Максвелловскими, что приводит к изменению соотношения ролей сравниваемых процессов. Так, распространенным способом измерения коэффициента диссоциативной рекомбинации является метод совмещенных пучков [77], в рамках которого за счет разности потенциалов между анодом и катодом настраивается энергия отстройки E_d между электронами и ионами. В подобных установках функция распределения скоростей электронов принимает вид [77]

$$f(v_e, v_d) = \frac{m_e}{2\pi k_B T_\perp} \exp\left(-\frac{m_e v_\perp^2}{2k_B T_\perp}\right) \sqrt{\frac{m_e}{2\pi k_B T_\parallel}} \exp\left(-\frac{m_e (v_\parallel - v_d)^2}{2k_B T_\parallel}\right). \quad (3.63)$$

Здесь v_d — это скорость отстройки, определяемая выражением $E_d = m_e v_d^2/2$, v_\perp — скорость поперечного движения, а T_\perp — эффективная температура поперечного движения, которая может быть положена равной электронной температуре T_e . Температура T_\parallel описывает движение электрона со скоростью v_\parallel относительно иона вдоль оси установки, и ее величина оказывается много меньше T_e , $T_\parallel \sim$ мэВ, за счет эффекта кинематического сжатия.

Ключевое влияние энергии отстройки на динамику резонансного заселения ридберговских состояний заключается в смещении характерной области резонансных переходов в сторону меньших R . При больших E_d переходы происходят преимущественно вблизи R_n^d , определяемом из условия $\Delta U_{fi}(R_n^d) = Ry/n^2 + E_d$. Величина E_d обычно варьируется в пределах от 0 до 0.3 эВ, так что при $E_d \sim D_0$ характерная область переходов, происходивших прежде вблизи положения равновесия R_e , может значительно сместиться в сторону $R \lesssim R_e$, что приводит к существенному усилению относительной эффективности резонансного трехчастичного захвата на низкие уровни n . Данный эффект продемонстрирован на рис. 3.7 для системы $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ при $T_e = 1500$ К и газовых температурах $T = 300$ К и 600 К. Из рисунка видно, что при введении энергии отстройки $E_d = 0.15$ эВ относительная эффективность процесса трехчастичного захвата на низкие n возрастает вплоть до 2 раз при $T = 600$ К и до 5 раз при $T = 300$ К. При этом эффективность трехчастичного захвата на высокие уровни $n > 16$, наоборот, падает, выходя на плато, так как переходы, ранее происходившие вблизи $R_n \gtrsim R_e$, с введением энергии отстройки происходят вблизи точки $R_n^d \sim R_e$, определяемой для больших n из условия $\Delta U_{fi}(R_n^d) \approx E_d$. Важно также отметить, что эффект неравновесного распределения ослабевает при увеличении газовой температуры T из-за того, что становится более широкой характерная область межъядерных расстояний R , вносящих вклад вероятность неадиабатических переходов.

Продemonстрированное на рисунке 3.7 влияние неравновесного распределения электронных скоростей на относительную эффективность резонансных процессов захвата играет ключевую роль в задачах кинетики рекомбинации, а также в ряде прикладных задачах, связанных, в частности, с разработкой инфракрасных лазеров на смесях Rg/Xe , так как в них особенно важен характер

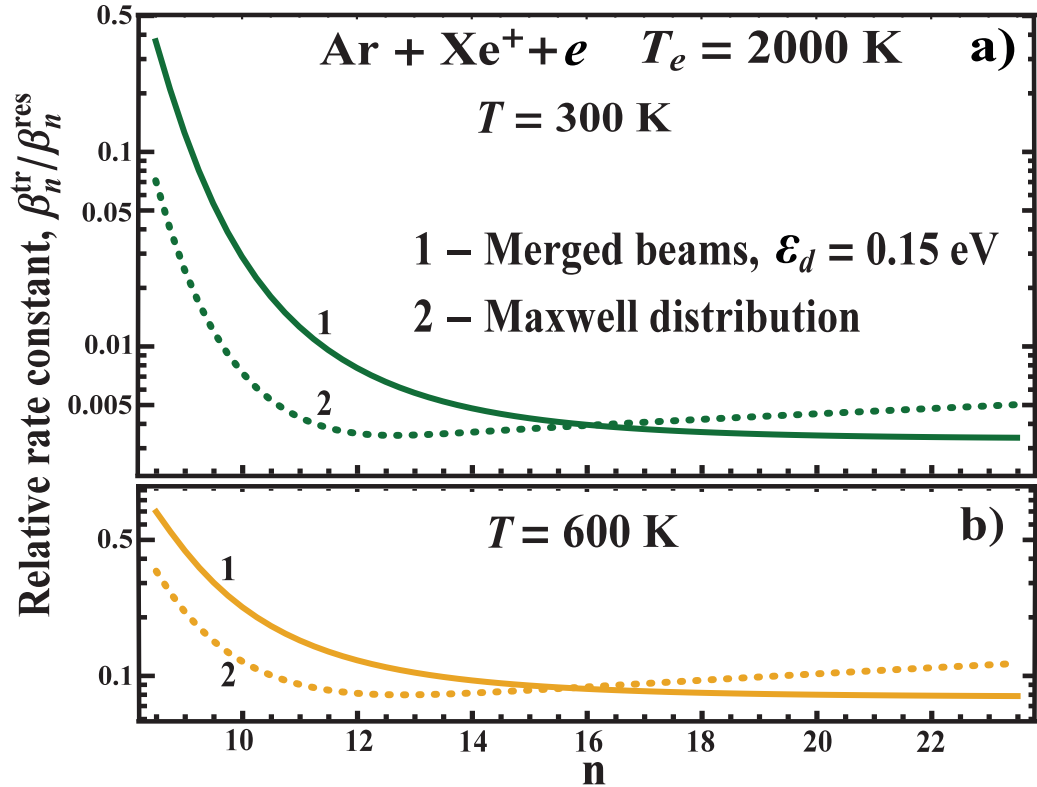


Рис. 3.7: Относительный вклад, $\beta_n^{\text{tr}}/\beta_n^{\text{res}}$, резонансного трехчастичного захвата электронов (3.2) в полную константу скорости, $\beta_n^{\text{res}} = \beta_n^{\text{tr}} + \beta_n^{\text{dr}}$, резонансного захвата на все lm -подуровни уровня n , также включающую вклад диссоциативной рекомбинации (3.1) со всех колебательно-вращательных уровней молекулярного иона. Расчеты проведены для случая эксперимента с совмещенными пучками с $E_d = 0.15$ эВ (кривые 1) и для равновесного случая в ячейках (кривые 2) для системы $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ при электронной температуре $T_e = 1500$ К и газовых температурах $T = 300$ К (синие кривые) и 600 К (красные кривые).

заселения низких уровней атомов.

3.6.4. Сравнение результатов расчета коэффициента диссоциативной рекомбинации с литературными данными

В рамках данной работы было проведено сопоставление результатов расчетов полных констант скорости диссоциативной рекомбинации α^{dr} [$\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$] с теоретическими и экспериментальными результатами из других работ. Экспериментальные данные по константам скоростей процессов (3.1) и (3.2) диссоциативного и трехчастичного захвата электронов на заданные ридберговские уровни атомов $\text{Xe}(n)$ в плазме смесей инертных газов отсутствуют. Ниже сопоставлены просуммированные по n константы скорости диссоциативной рекомбинации, рассчитанные с использованием разработанной здесь теории, со значениями, $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T)$, полученными с помощью экспериментальных данных и полуэмпирических формул.

На рисунке 3.8а приведены температурные зависимости полных констант скоростей рекомбинации, $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T)$, при столкновениях электронов с ионами NeXe^+ ($T=300$ К) и ArXe^+ ($T=500$ и 900 К). Сплошные кривые показывают суммарную по $n \geq 10$ и $l \leq n-1$ константу скорости $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T) = \sum_{nl} \alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T)$ процесса (3.1), рассчитанную по формулам (3.32) и (3.42) данной работы для захвата электрона на отдельные nl -уровни. Пунктирная кривая для NeXe^+ получена с помощью полуэмпирической формулы $\alpha^{\text{dr}}(T_e) \sim \alpha_0 T_e^{-0.5}$ [74, 132] и экспериментальных данных [127, 128]. Видно, что результаты разумно согласуются друг с другом при $T_e = 300 \div 2000$ К. Отметим, что зависимость $T_e^{-0.5}$ также следует из результатов диссертационной работы, если ограничить переходы областью точки стабилизации $R_\omega = R_{\text{st}} \equiv R_n$, определяемой условием (3.19).

Пунктирные кривые на рисунке 3.8b,c для ArXe^+ задаются формулой модифицированной модели, $\alpha^{\text{dr}}(T, T_e) = \alpha_0 T_e^{-0.5} [1 - \exp(-\hbar\omega_v/k_B T)]$, предложенной в [74, 132] на основе экспериментальных данных [128]. Здесь $\hbar\omega_v$ – колебательный квант основного терма U_i . Зависимость от T получена усреднением по бoльцмановскому распределению колебательных уровней предполагая, что вклад основного колебательного состояния в $\alpha^{\text{dr}}(T, T_e)$ является преобладающим. Как видно из рисунков 3.8b,c, такая модель дает разумную оценку при низких значениях T , однако, подобно NeXe^+ , она приводит к ошибкам при более высоких значениях T_e и T . Заметим, что отклонение от зависимости $T_e^{-0.5 \pm 0.2}$ константы скорости $\alpha^{\text{dr}}(T, T_e)$ в сторону степенной зависимости $T_e^{-3/2}$ при вы-

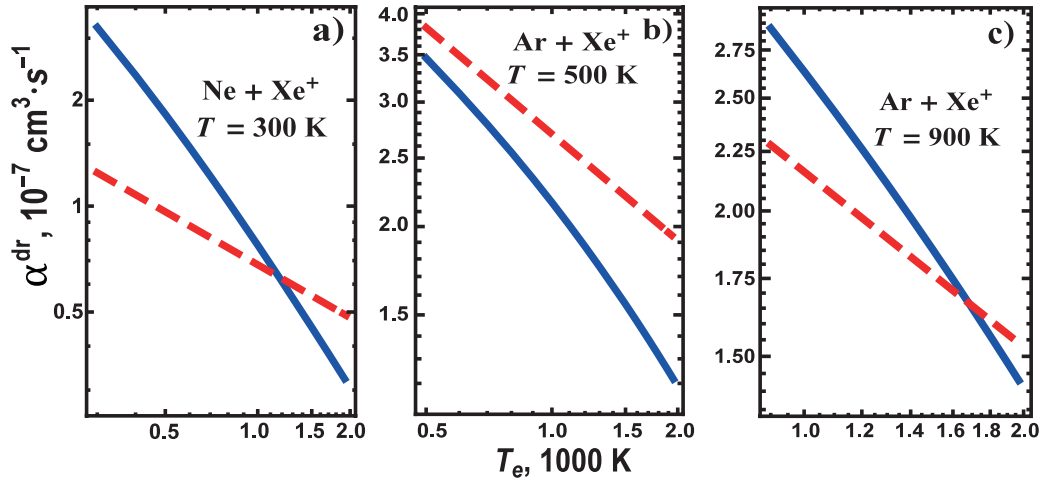


Рис. 3.8: Константы скорости диссоциативной рекомбинации ионов NeXe^+ (a) и ArXe^+ (b, c) с электронами. Сплошные кривые – суммарная константа скорости, $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T) = \sum_{nl} \alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T)$, где $\alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T)$ получена по формулам (3.32) и (3.42). Пунктирные кривые – полуэмпирическая формула, $\alpha^{\text{dr}}(T, T_e) = \alpha_0 T_e^{-0.5} [1 - \exp(-\hbar\omega_v/k_B T)]$ [74, 132], где α_0 определено по экспериментальным данным [127, 128]. $T=300$ К (a), 500 К (b) и 900 К (c).

соких значениях T_e было также предсказано в работе [113] для системы $\text{Ar}_2^+ + e$. Следует учесть, что оценка коэффициента диссоциативной рекомбинации путем прямого суммирования констант скоростей, соответствующих всем конечным значениям n , подходит лишь для качественного сравнения результатов, что связано с пренебрежением влияния ряда сопутствующих рекомбинационных и релаксационных процессов.

В рамках данного исследования было проведено сопоставление коэффициентов диссоциативной рекомбинации $K^{\text{d.r.}}$ [$\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$] не только для гетероядерных, но и для гомоядерных ионов инертных газов. Сравнение проводилось с теоретической [170] и экспериментальной [171] работой для системы $\text{Ne}_2^+ + e$, а также с теоретической [113] и экспериментальными [85, 172, 173] работами для системы $\text{Ar}_2^+ + e$. Важно отметить, что применимость используемого в диссертации подхода для расчета полного коэффициента диссоциативной рекомбинации $K^{\text{d.r.}}$ подобных сильносвязанных систем оказывается крайне ограничена. Основная сложность связана с тем, что ключевой вклад в величину $K^{\text{d.r.}}$ вносят захваты на наиболее низколежащие возбужденные уровни атомов неона и аргона ($3s$, $3p$, $4s$ и $4p$), из-за чего применяемые в диссертации выражения для автоионизационных ширин $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow nl}(R)$ оказываются неточными. Разработанная же в данной диссертации модель, в первую очередь, описывает заселение ридберговских состояний атомов в условиях возбуждения большого количества состояний колебательно-вращательного квазиконтинуума. Таким образом, прямое количе-

ственное сравнение результатов проведенных расчетов с результатами других теоретических и экспериментальных работ не дает возможность однозначно оценить точность представленного в диссертации подхода, однако позволяет дать ему качественную оценку на предмет соответствия с другими работами по таким показателям, как характерные значения величины $K^{\text{d.r.}}$, поведение $K^{\text{d.r.}}(T_e, T)$ при изменении температур T и T_e , а также вклад в $K^{\text{d.r.}}$ от различных колебательных состояний ионов Rg_2^+ ($\text{Rg} = \text{Ne}, \text{Ar}$).

Ввиду сравнительно высоких значений колебательного кванта ω_e не выполняется условие $k_B T \gg \hbar \omega_e$, так что приближение колебательного квазиконтинуума 3.23 не действует, и требуется отдельный расчет сечения диссоциативного захвата $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(vJ)$ для каждого колебательно-вращательного состояния vJ по формуле 3.8. Далее сечение диссоциативной рекомбинации для колебательного уровня v рассчитывается путем усреднения по J :

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(v) = \sum_0^{J_{\text{ext}}} \frac{\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(vJ) S_{nl}^J(R_\omega)(2J+1)}{\sum_0^{J_{\text{ext}}} (2J+1)}. \quad (3.64)$$

Здесь J_{ext} — верхний предел интегрирования по J , равный $J_{\text{max}}(R_\omega, E_v)$ в случае, если точка резонансного перехода R_ω расположена в классически разрешенной области. В противном случае $J_{\text{ext}} = 0$. Важно отметить, что в случае рассмотрения столь тяжелых систем в низких колебательных состояниях скорость относительного движения ядер оказывается малой, так что необходимо учитывать фактор автоионизационного распада $S_{nl}^J(R_\omega)$, включенный в формулу (3.64).

Константа скорости диссоциативного захвата на уровень nl с колебательного состояния v рассчитывается путем интегрирования по распределению Максвелла

$$\alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, v) = \int_0^\infty v_\varepsilon \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{\text{dr}}(v) f_{T_e}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.65)$$

после чего окончательное выражение для константы скорости диссоциативного захвата получается в результате усреднения по распределению Больцмана для колебательных уровней

$$\begin{aligned} \alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T) &= \sum_{v=0}^{v_{\text{max}}} \alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, v) \frac{N_v}{N} \approx \\ &\approx \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega_e}{kT}\right) \right] \sum_{v=0}^{v_{\text{max}}} \alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, v) \exp\left(-\frac{\hbar \omega_e v}{kT}\right) \end{aligned} \quad (3.66)$$

Для расчета коэффициента диссоциативной рекомбинации $K^{\text{d.r.}}(T_e, T)$ формально необходимо просуммировать $\alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T)$ по всем уровням nl . На практике, однако, преобладающий вклад в $K^{\text{d.r.}}(T_e, T)$ вносят только захваты на наиболее низколежащие возбужденные уровни атомов, поскольку соответствующие точки перехода R_w расположены наиболее близко к положению равновесия молекулярных ионов Rg_2^+ . По этой причине в рамках данной работы расчеты коэффициентов диссоциативной рекомбинации ограничивались учетом только уровня $3s$ в случае Ne_2^+ и уровня $4s$ в случае Ar_2^+ .

На рисунке 3.9 представлено сравнение полученных в данной работе результатов расчетов с результатами других теоретических и экспериментальных работ для системы Ne_2^+ при $T = 300$ К (рис. 3.9а) и для системы Ar_2^+ при $T = T_e$ (рис. 3.9б). Данные по потенциальным кривым ионов Rg_2^+ и квазимолекул $\text{Rg}+\text{Rg}(nl)$, требуемые для расчетов, были взяты из теоретических работ [170] (для Ne_2^+) и [113] (для Ar_2^+), с которыми проводилось сравнение. Данные по спектроскопическим константам ионов Ne_2^+ и Ar_2^+ были взяты из работы [174]. Как видно из рис. 3.9а, результаты проведенных в диссертации расчетов незначительно ($\sim 1.2 - 1.5$ раз) превышают аналогичные теоретические результаты из работы [170] в области низких T_e . Данное отличие в первую очередь связано с тем, что используемый в диссертации подход к расчету автоионизационных ширин дает завышенные результаты по сравнению с аналогичными результатами в [170]. Полученные в диссертации результаты также находятся в хорошем согласии с экспериментом [171] при $T_e \leq 1000$ К. Результаты обоих теоретических расчетов демонстрируют традиционно наблюдаемую зависимость $T_e^{-0.5 \pm 0.15}$ в области низких температур. Кроме того, теоретические данные из обеих сравниваемых работ (в отличие от эксперимента [171]) выходят на зависимость $T_e^{-3/2}$ в области высоких T_e . Однако, кривая по нашим расчетам быстрее убывает и, соответственно, быстрее выходит на указанную зависимость. Различие в скорости убывания связано с тем, что, согласно нашим расчетам, из-за более высоких значений автоионизационной ширины $\Gamma_{\epsilon \rightarrow nl}$ с ростом энергии электронов значительно возрастает влияние автоионизационного распада, понижающего эффективность диссоциативной рекомбинации.

Из рис. 3.9б следует, что результаты проведенных расчетов в случае Ar_2^+ значительно отличаются от аналогичных результатов из теоретической работы [113] в области низких температур $T_e = T$. При этом оба теоретических расчета демонстрируют близкую зависимость от температуры $T_e^{-0.5 \pm 0.2}$ в об-

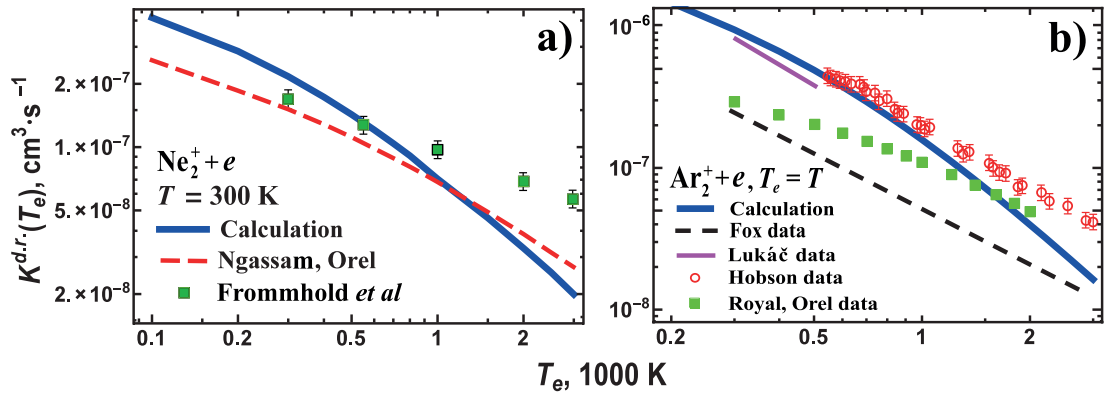


Рис. 3.9: Сравнение измеренных и рассчитанных коэффициентов диссоциативной рекомбинации ионов Ne_2^+ (рис. а) и Ar_2^+ (рис. б) при $T = 300 \text{ K}$ (рис. а) и $T = T_e$ (рис. б), в зависимости от электронной температуры T_e . (а) Проведенные расчеты сопоставлены с теоретическими результатами (Ngassam, Orel [170]) и измерениями из (Frommhold *et al*, [171]). (б) Проведенные расчеты сопоставлены с теоретическими результатами из (Royal, Orel data [113]), а также данными из экспериментов с ударными волнами (Hobson data [85], Fox data [173]) и с данными из работ по послесвечению плазмы тлеющего разряда (Lukáč data [172]).

ласти низких T_e , но, аналогично случаю с Ne_2^+ , кривая по представленным в диссертации данным гораздо быстрее убывает с ростом T_e и значительно быстрее (примерно с $T = 1000 \text{ K}$) выходит на зависимость $T_e^{-1.5}$. Подобная зависимость наблюдалась в целом ряде экспериментальных работ [85, 172, 173] даже при низких температурах. Как видно из рис. 3.9б, проведенные расчеты в области низких $T_e = T$ существенно (более, чем в 2 раза) расходятся с результатами работы [173], однако находятся в хорошем соответствии с более поздними экспериментальными данными [85, 172].

3.6.5. Сравнение эффективности резонансного трехчастичного захвата электронов с альтернативными механизмами

Ранее в данной главе были представлены результаты сравнительного анализа процессов диссоциативной рекомбинации (3.1) с ранее почти не исследованными процессами резонансного трехчастичного захвата (3.2). Было показано, что трехчастичный механизм (3.2) играет существенную роль при заселении низколежащих уровней $n \lesssim 10$, а также в случае рассмотрения молекулярных ионов RgXe^+ при условиях $D_0 \lesssim k_B T$. Кроме того, было показано, что роль трехчастичного процесса (3.2) может быть дополнительно усилена при рассмотрении случаев неравновесного распределения скоростей свободных электронов, как, например, в опытах с совмещенными пучками. Указанные сведения играют крайне существенную роль для целого ряда прикладных задач, связанных с ис-

следованием процессов заселения отдельно взятых уровней атомов (например, при изучении механизмов образования инверсной заселенности в ксеноновых лазерах на смесях Ar/Xe). Однако, для полноты картины целесообразно также провести сравнение резонансного трехчастичного механизма (3.2) с иными, традиционными механизмами захвата при тройных столкновениях с нейтральными частицами (2.1) и свободными электронами (1.1). Результаты соответствующего сравнительного анализа будут представлены в данном разделе.

На рисунке 3.10 представлены зависимости констант скоростей резонансного, $\beta_n^{\text{tr}}(T, T_e)$, и нерезонансного, $\beta_n^{\text{cap}}(T, T_e)$, захвата электрона в тройных столкновениях с атомами Rg от главного квантового числа n атома Xe для столкновительных систем $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$. Расчеты $\beta_n^{\text{tr}}(T, T_e)$ проводились на основе представленного в данной главе подхода. Величина $\beta_n^{\text{cap}}(T, T_e)$, в свою очередь, вычислялась по формулам из Главы 2 с использованием выражения (2.5) для эффективного сечения захвата электрона и соотношений (2.6)–(2.10). Это позволяет учесть эффекты короткодействующего и поляризационного взаимодействия слабосвязанного электрона с атомами инертных газов, что особенно важно для неупругих переходов с достаточно большими передачами энергии [51, 52]. Данные по фазовым сдвигам при рассеянии ультра-медленных электронов на атомах Ar и Ne взяты из работ [175, 176]. Электронная и газовая температуры полагались равными $T_e = 2000$ К и $T = 300, 900$ К.

Из рис. 3.10 следует кардинально различный характер заселения ридберговских уровней $n \gg 1$ атома ксенона в результате резонансного и нерезонансного процессов захвата при тройных столкновениях с участием нейтральных частиц. В случае традиционного процесса захвата (2.1) заселение уровней протекает тем эффективнее, чем меньше энергия связи ридберговского состояния атома (то есть чем выше n). Совершенно иная картина наблюдается в случае резонансного процесса трехчастичного захвата (3.2) — для данного процесса преобладает заселение ограниченного набора низколежащих ридберговских уровней $n \lesssim 30$. Для обоих столкновительных систем механизм резонансного трехчастичного захвата (3.2) совпадает по эффективности с нерезонансным механизмом (2.1) при $n \sim 60$ ($T = 300$ К) и $n \sim 40$ ($T = 900$ К). При заселении же низколежащих уровней $n \lesssim 30$ резонансный процесс (3.2) существенно (на 2-4 порядка) превосходит нерезонансный трехчастичный процесс (2.1). При увеличении газовой температуры T относительная эффективность нерезонансного канала (2.1) возрастает (что можно увидеть из формулы (2.21) из Главы 2), однако в области низких

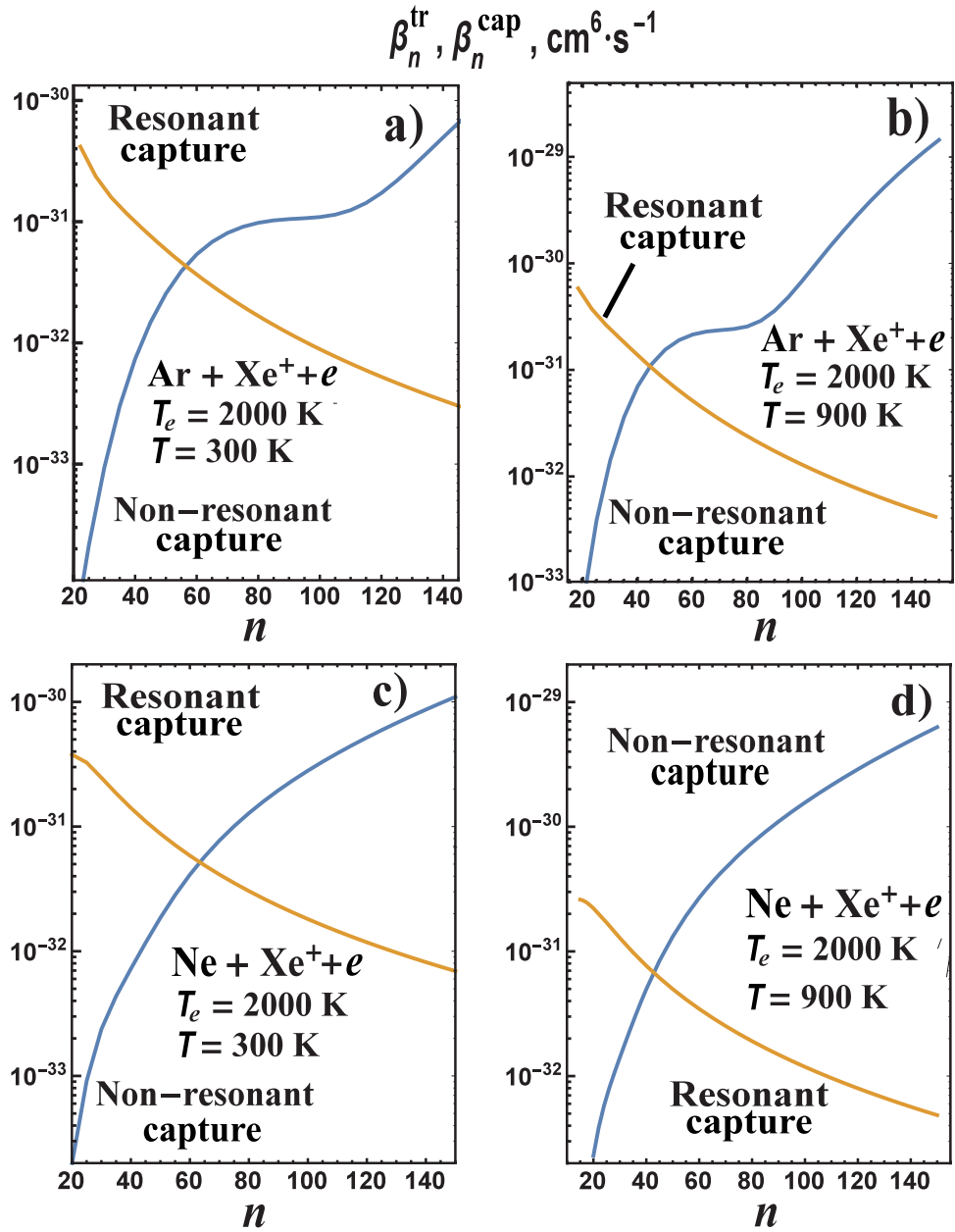


Рис. 3.10: Константы скорости β_n^{tr} и β_n^{cap} трехчастичного резонансного (3.2) и нерезонансного (2.1) захвата электронов на все lm -подуровни уровня n атома Xe^* в столкновениях с атомами Ar (a, b) и Ne (c, d) при $T_e=2000 \text{ K}$ и $T=300, 900 \text{ K}$.

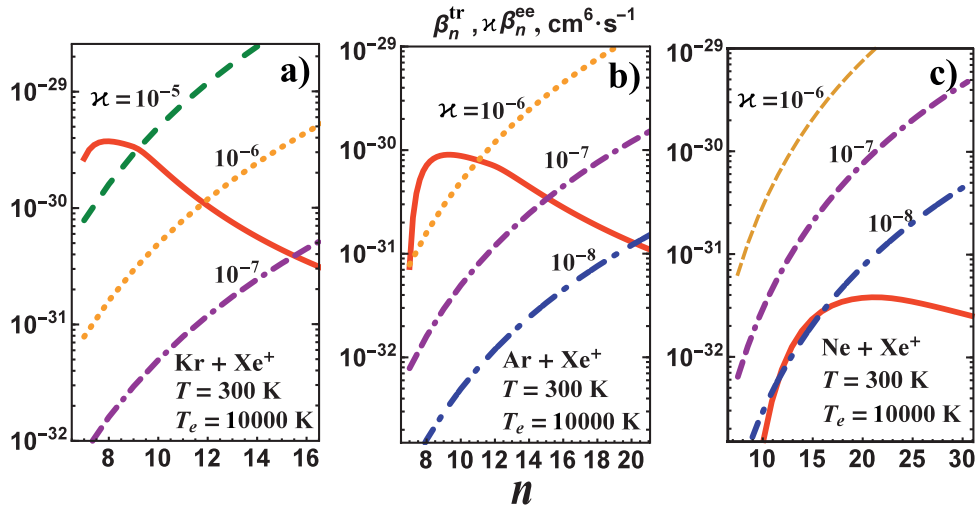


Рис. 3.11: Сравнение эффективностей трехчастичного захвата электронов на ридберговские уровни атома $Xe(n)$ в резонансных реакциях (3.2): $Xe^+ + e + Kr$ (a), $Xe^+ + e + Ar$ (b) и $Xe^+ + e + Ne$ (c), и в столкновениях с электронами (1.1) при различных степенях ионизации \varkappa ($T=300$ К, $T_e=10000$ К). Сплошные кривые – константы скорости β_n^{tr} процесса (3.2). Штриховые кривые – относительная эффективность $\tilde{\beta}_n^{ee} = \beta_n^{ee} \varkappa$ процесса (1.1).

n она по-прежнему остается крайне малой. Поэтому при построении кинетики рекомбинации в плазмах, содержащих слабосвязанные молекулярные ионы, а также при анализе динамики заселения ридберговских состояний атомов, представляющих интерес для прикладных задач разработки лазеров, часто можно пренебречь влиянием нерезонансного захвата при столкновениях с нейтральными частицами. Этот процесс может играть существенную роль при достаточно больших значениях длины рассеяния электрона на возмущающем атоме, а также для ионов с очень низкой энергией диссоциации D_0 и малой приведенной массой (например, $NeXe^+$). В этом случае резонансные процессы оказываются ослабленными, а нерезонансный захват, напротив, усилен.

Теперь приведем результаты сравнительного анализа эффективности резонансного трехчастичного механизма (3.2) и традиционного механизма захвата на уровни n при тройных столкновениях со свободными электронами. На рис. 3.11 представлены данные по соответствующим расчетам для газовой температуры $T=300$ К и электронной температуры $T_e=10000$ К. Вклад сопоставляемых механизмов в динамику заселения n -уровней характеризуется величинами $\beta_n^{tr} N_B N_e$ и $\beta_n^{ee} N_e^2$. Отношение данных величин, а следовательно, и относительная эффективность сравниваемых процессов зависят от степени ионизации плазмы, $\varkappa = N_e / N_B$. Поэтому на рис. 3.11 приведены результаты и для константы скорости β_n^{tr} резонансного процесса (3.2), и для относительной константы скорости, $\tilde{\beta}_n^{ee} = \beta_n^{ee} \varkappa$, трехчастичного захвата (1.1) при столкновениях со

свободными электронами плазмы. Величина β_n^{ee} рассчитана с использованием подхода из раздела 1.3.3 Главы 1. Видно, что процесс (1.1) определяет заселение рассматриваемых n -уровней при достаточно больших степенях ионизации: $\kappa \gtrsim 10^{-4}$ для KrXe^+ , ArXe^+ и $\kappa \gtrsim 10^{-6}$ для NeXe^+ . Далее с уменьшением κ начинается конкуренция сравниваемых механизмов (3.2) и (1.1). При этом электронные столкновения вносят доминирующий вклад в заселение высоковозбужденных уровней атома, в то время как резонансный механизм вносит ключевой вклад в заселение ограниченной области низколежащих уровней, определяемой параметрами термов молекулярных ионов RgXe^+ . Границы указанной области расширяются по мере уменьшения степени ионизации плазмы κ , так что при $\kappa \lesssim 10^{-8}$ заселение ридберговских уровней с $n \lesssim 30$ обусловлено исключительно резонансными процессами трехчастичного захвата.

Из сравнения рисунков 3.11a, 3.11b и 3.11c следует, что скорости резонансного трехчастичного захвата кардинально различаются для систем $\text{Kr} + \text{Xe}^+ + e$, $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$. В случае ионов с умеренными энергиями диссоциации (KrXe^+ и ArXe^+ , рис. 3.11a,b) происходит преимущественное резонансное заселение низколежащих уровней ($n \leq 15$), причем резонансный захват играет существенную роль даже при степенях ионизации $\kappa \sim 10^{-5}$. Напротив, для систем с малыми D_0 (NeXe^+ , рис. 3.11b) резонансные переходы на низкие уровни пренебрежимо малы (так как происходят в отталкивательной части терма U_i), и процесс резонансного трехчастичного захвата вносит существенный вклад в заселение только уровней с $n \gtrsim 15$. В целом, при малых D_0 константа скорости резонансного захвата мала по сравнению с $\tilde{\beta}_n^{ee}$ за исключением случаев низкой степени ионизации $\kappa \lesssim 10^{-7}$. Большие различия в максимумах констант скоростей резонансного трехчастичного захвата в системах $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ связаны в основном с тем, что сечения захвата на уровни n растут с уменьшением главного квантового числа.

Обобщая сказанное в данном разделе, отметим, что у резонансного трехчастичного процесса (3.2) наблюдается кардинально иной характер заселения ридберговских уровней n по сравнению с традиционными процессами захвата при столкновениях с участием нейтральных частиц (2.1) и электронов (1.1). Эффективность традиционных процессов тем выше, чем выше главное квантовое число n , в то время как резонансный канал (3.2) приводит к заселению преимущественно низколежащих ридберговских уровней $n \lesssim 20$, причем рабочая область захвата смещается в сторону низких n по мере увеличения энергии

диссоциации D_0 ионов BA^+ .

3.6.6. Диссоциативный захват электронов гетероядерными и гомоядерными ионами

Ранее в данной Главе значительное внимание было уделено изучению эффективности резонансных процессов трехчастичного захвата (3.2) и диссоциативной рекомбинации (3.1) гетероядерных ионов инертных газов $RgXe^+$. Но важно иметь в виду, что в низкотемпературной плазме смесей инертных газов, наряду с гетероядерными молекулярными ионами BA^+ , обычно присутствуют гомоядерные катионы A_2^+ . Хорошо известно, что диссоциативная рекомбинация этих ионов является одним из ключевых процессов, вносящих огромный суммарный вклад в кинетику электрон-ионной рекомбинации [77, 114]. Однако, в рамках исследования кинетики рекомбинации очень важен вопрос не только о суммарном вкладе, но и о распределении потока диссоциативной рекомбинации по всем возможным каналам. Данный вопрос имеет принципиальное значение в случае, когда требуется селективное заселение отдельно взятых уровней, как, например, при реализации инфракрасных ксеноновых лазеров на смеси инертных газов [12, 128, 133, 134]. Ввиду большой энергии диссоциации гомоядерных ионов их диссоциативная рекомбинация приводит к преимущественному заселению низших уровней, и поэтому становится важным наличие гетероядерных ионов, диссоциативная рекомбинация которых обеспечивает захват на более высокие состояния. При этом необходимо знание констант скорости диссоциативного захвата α_n^{dr} на весь рабочий набор высоковозбужденных состояний n , поскольку селективное заселение требуемых уровней может проходить как напрямую, так и в результате каскада процессов де-возбуждения [133]. В этом контексте большое значение имеет сравнительный анализ величин α_n^{dr} для систем A_2^+ и BA^+ при захвате на высокие n . Подобный анализ будет проведен в этом разделе для гомоядерных ионов Xe_2^+ и гетероядерных ионов $NeXe^+$, $ArXe^+$ и $KrXe^+$. Кроме того, в рамках целого ряда задач, включая исследование гелий-ксенонового микрозаряда [156] и создание эксимерных ламп [130], важен сравнительный анализ полного вклада всех каналов диссоциативного захвата гомоядерных и гетероядерных ионов в кинетику рекомбинации.

Результаты расчетов констант скоростей диссоциативного захвата электронов ионами $KrXe^+$ ($D_0 = 400$ мэВ), $ArXe^+$, $NeXe^+$ и Xe_2^+ в ридберговские состояния представлены на рис. 3.12. Расчеты проведены в рамках представленной в

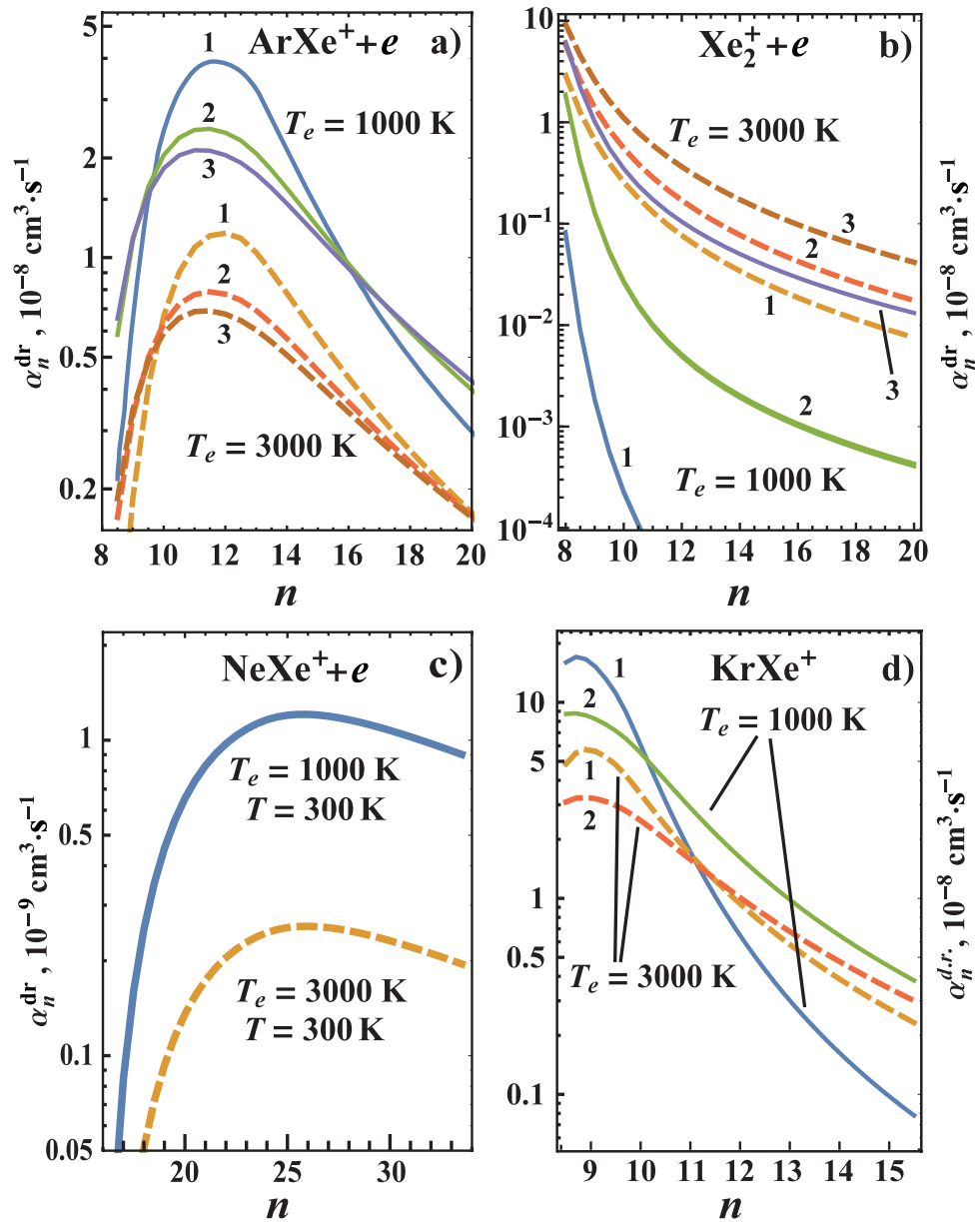


Рис. 3.12: Константы скорости, $\alpha_n^{dr}(T, T_e)$, диссоциативного захвата электронов (3.1) на все lm -подуровни атома Xe(n) для систем ArXe⁺ + e (a), Xe₂⁺ + e (b), NeXe⁺ + e (c) и KrXe⁺ (d) при температурах электронов $T_e=1000 \text{ K}$ (сплошные кривые) и 3000 K (штриховые кривые) и газа $T=300 \text{ K}$ – 1, 700 K – 2, и 1000 K – 3.

этой главе теории при температурах $T_e=1000$ и 3000 К и $T=300$, 700 и 1000 К и учитывают сложную структуру уровней атома $\text{Xe}[5p^5(^2P_j)nl[K]\mathcal{J}]$, связанную с наличием квантовых дефектов при $l < 3$. Сравнение рис. 3.12а, 3.12б, 3.12с и 3.12д указывает на существенные различия в поведении констант скоростей реакции (3.1) в рассматриваемых системах в зависимости от n .

В случае иона Xe_2^+ , из-за большой энергии диссоциации $D_0 = 0.97$ эВ, в процессе рекомбинации преобладает [114] заселение низколежащих возбужденных уровней атома Xe с $n \lesssim 8$. Расчет констант скоростей захвата на эти уровни должен проводиться другими методами (см. [77]). Для умеренно связанных ионов ArXe^+ и KrXe^+ наиболее существенная область диссоциативного захвата, приводящего к заселению ридберговских уровней, сдвинута в область $8 \lesssim n \lesssim 15$ и имеет максимум при $n \approx 12$ для ArXe^+ и $n \approx 9$ для KrXe^+ (см. рис. 3.12а,д). Константы скорости захвата, α_n^{dr} , превосходят соответствующие величины для иона Xe_2^+ на 2–3 порядка при $T_e = 1000$ К и на порядок величины при $T_e = 3000$ К. Для иона NeXe^+ основная область диссоциативного захвата сдвинута в сторону еще более высоких $n \sim 20$, ввиду малого значения D_0 , так что суммарная эффективность этого процесса оказывается крайне малой в сравнении с диссоциативным захватом электронов ионами ArXe^+ и Xe_2^+ .

При заселении уровней с $8 \lesssim n \lesssim 20$ в системах $\text{KrXe}^+ + e$ и $\text{ArXe}^+ + e$ эффективность диссоциативного захвата традиционно растет с уменьшением газовой T и электронной T_e температур. Как следует из рис. 3.12б, в случае системы $\text{Xe}_2^+ + e$ при заселении тех же уровней имеет место обратная зависимость константы скорости, $\alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$, от температур – вероятность захвата падает при понижении T и T_e . Нетипичная зависимость от T обусловлена тем, что при заселении возбужденных уровней n наибольший вклад в переходы вносят колебательно-вращательные состояния ядер с энергией $E_{vJ} \approx U_i(R_w)$ (R_w – точка резонансного неадиабатического перехода), и их населенность при низких T мала. Низкая эффективность диссоциативного захвата гомоядерных ионов на высокие уровни n при малых T_e указывает на пороговый характер протекания процесса: энергия электронов должна быть достаточно высокой, чтобы скомпенсировать различие между дном потенциальной ямы основного терма и областью резонансных переходов, то есть требуется $k_B T_e \sim D_0 - |U_i(R_w)|$. Таким образом, процесс диссоциативного захвата электронов гетероядерными ионами гораздо эффективнее заселяет высоковозбужденные уровни атома Xe с $n \gtrsim 10$, чем в случае гомоядерного иона Xe_2^+ . При этом относительный вклад

гетероядерных ионов стремительно возрастает по мере понижения температур T и T_e .

Продемонстрированное на рис. 3.12b поведение кривых $\alpha_n^{\text{dr}}(T, T_e)$ вступает в кажущееся противоречие с многочисленными экспериментальными результатами, согласно которым коэффициент диссоциативной рекомбинации гомоядерных ионов инертных газов падает с ростом температур T и T_e . Данное расхождение обусловлено тем, что измеряемые в экспериментальных работах коэффициенты рекомбинации $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T)$ включают захват на все допустимые уровни атомов n и могут быть приближенно описаны как сумма $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T) \approx \sum_n \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$. В случае Xe_2^+ наибольший вклад в такую сумму вносят низколежащие уровни атома Xe, захват на которые нельзя точно описать в рамках представленного в диссертации подхода, примененного для ридберговских состояний $n_* \gg 1$. Тем не менее, качественные оценки, сделанные с помощью представленной в данной работе модели, показывают, что константы скорости захвата на низкие уровни $\alpha_{\text{low}}^{\text{dr}}(T_e, T)$, как и полный коэффициент $\sum_n \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$, убывают с ростом температур.

Из рисунка 3.12 следует, что для того, чтобы влияние диссоциативного захвата гетероядерных ионов RgXe^+ на кинетику рекомбинации плазмы и на динамику заселения низколежащих ридберговских уровней $n \leq 10$ было значительным, необходимо, чтобы их концентрация, $[\text{RgXe}^+]$, более, чем на порядок превосходила концентрацию $[\text{Xe}_2^+]$. При равновесном распределении молекулярных ионов в плазме смеси Rg/Xe такое условие практически недостижимо при низких газовых температурах $T = 300 - 500$ К из-за большой величины D_0 иона Xe_2^+ (что показано на рисунке 3.2). Однако, в целом ряде работ [12, 14, 128, 130, 156] создавались неравновесные условия, при которых концентрация молекулярных ионов определяется эффективностью процессов ионной конверсии. При условии $[\text{Rg}] \gg [\text{Xe}]$ конверсия атомарных ионов Xe^+ в ионы Xe_2^+ протекает намного медленнее, чем в гетероядерные ионы RgXe^+ , так что влияние диссоциативного захвата электронов ионами Xe_2^+ на кинетику рекомбинации может быть слабым. Таким образом, в условиях проводимых экспериментов существенная роль резонансных процессов захвата электронов гетероядерными ионами RgXe^+ может проявляться даже при газовых температурах $T \approx 300 - 500$ К.

3.7. Итоги расчетов и теоретического анализа

В этой главе были представлены результаты исследования двух взаимодополняющих процессов (3.1) и (3.2) заселения ридберговских состояний в низкотемпературной плазме смесей инертных газов. Для единого описания указанных процессов был разработан оригинальный квазиклассический подход в теории неадиабатических переходов. В данном подходе учитываются вид и симметрия термов гетероядерных VA^+ и гомоядерных ионов A_2^+ , особенности взаимодействия внешнего и внутренних электронов для каждой рассматриваемой системы, а также сложная структура неводородоподобных ридберговских состояний атома ксенона. При расчете усредненных по больцмановскому распределению сечений и констант скоростей диссоциативной рекомбинации (3.1) применялось приближение квазинепрерывного спектра колебательно-вращательных состояний vJ молекулярных ионов. Схожий метод интегрирования по энергии относительного движения E и угловому моменту J был реализован при расчете констант скоростей резонансного трехчастичного захвата (3.2). Использование указанных методов позволило добиться единообразного описания обоих резонансных процессов захвата (3.1) и (3.2) в условиях существенного теплового возбуждения всего колебательно-вращательного квазиконтинуума молекулярного иона. В случае гетероядерных ионов инертных газов $RgXe^+$ подобные условия реализуются уже при газовых температурах $T \sim 300 - 1000$ К, характерных для плазмы послесвечения разряда в смесях инертных газов.

Подавляющее большинство конкретных расчетов, описанных в главе, проведены для гетероядерных систем $Rg + Xe^+ + e$ с малой ($NeXe^+$) и умеренной ($ArXe^+$) энергией диссоциации молекулярных ионов. Рассмотрение проводилось при параметрах плазмы, типичных для плазмы послесвечения разрядов в смесях инертных газов. Одна из главных задач заключалась в изучении эффективности резонансных процессов захвата (3.1) и (3.2) на ридберговские уровни в зависимости от основных параметров модели: (а) — температур T и T_e , (б) — главного квантового числа, (в) — параметров термов молекулярных ионов $RgXe^+$ и (г) — отношения тепловой энергии $k_B T$ к энергии диссоциации D_0 .

Проведенный анализ показал, что в случае гетероядерных ионов $RgXe^+$ резонансные процессы захвата (3.1) и (3.2) способствуют преимущественному заселению ограниченного набора низколежащих уровней. Положение максимума n_{\max} в зависимостях сечений и констант скоростей от n определяется свойства-

ми термов $U_i(R)$ и $U_f(r)$ и может быть приблизительно оценено из условия, что переходы, сопровождающиеся захватом на уровень n_{\max} , происходят вблизи положения равновесия нижнего терма R_e , т. е. $\Delta U_{fi}(R_e) \approx Ry/n_{\max}^2$. В случае умеренносвязанных ионов (ArXe^+) резонансные процессы (3.1) и (3.2) приводят к преимущественному заселению уровней с $n_{\max} \approx 10$, в то время как в случае слабосвязанных систем (NeXe^+) преобладают захваты на уровни $n \sim 15 - 25$. Показано, что итоговая эффективность резонансных захватов (3.1) и (3.2) на все рассматриваемые уровни тем выше, чем выше энергия диссоциации молекулярных ионов D_0 .

Еще одна важная задача состояла в сравнении хорошо исследованного процесса диссоциативной рекомбинации (3.1) с практически неизученным процессом резонансного трехчастичного захвата (3.2). Сравнительный анализ показал, что доля резонансного трехчастичного захвата электронов атомарными ионами в полной константе скорости захвата на ридберговские уровни может быть близка к 100% в случае слабосвязанных систем (например, NeXe^+). При этом канал (3.2) приводит к преимущественному заселению высоковозбужденных уровней с $n \gtrsim 10$. Зависимости соответствующих констант скоростей захвата от n в наибольшей степени определяются газовой температурой T и структурой термов.

Иная ситуация наблюдается для ионов с умеренно глубокими потенциальными ямами, $D_0 \gtrsim k_B T$ (например, ArXe^+): в этом случае доминирует канал диссоциативного захвата (3.1) с участием всех колебательно-вращательных уровней vJ . Эти выводы относятся к ситуациям, когда справедливы больцмановское распределение по уровням vJ и закон действующих масс (3.48) для частиц, находящихся в свободном и связанном состояниях. Было показано, что отклонения от больцмановского и максвелловского распределений могут приводить к существенно иной относительной роли каналов диссоциативной и тройной рекомбинации, и, в частности, могут увеличить долю трехчастичного процесса (3.2) в захвате электронов на ридберговские уровни атомов.

Для рассматриваемых столкновительных систем $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ проведен сравнительный анализ эффективности резонансного трехчастичного процесса захвата (3.2) и традиционных нерезонансных трехчастичных механизмов (2.1) и (1.1). Расчеты были проведены при температурах T и T_e и степенях ионизации α , характерных для плазмы послесвечения разрядов. Были найдены области доминирования резонансного механизма трехчастичного захвата

(3.2). Обнаружены существенные различия результатов для рассматриваемых систем. Установлено, что в случае умеренно связанных систем с энергией диссоциации $D_0 \gtrsim 100$ мэВ (здесь ArXe^+) наблюдается доминирование резонансного трехчастичного захвата электронов на низкие уровни с $n \lesssim 15$ за исключением случая плазмы с высокими степенями диссоциации $\kappa \gtrsim 10^{-4}$.

Захват электронов на высоковозбужденные уровни с $n \gtrsim 20$ происходит за счет тройных столкновений со свободными электронами плазмы (1.1). Влиянием нерезонансного захвата (2.1) в тройных столкновениях с атомами буферного газа можно пренебречь при не слишком больших газовых температурах $T \lesssim 1000$ К и степенях ионизации $\kappa \gtrsim 10^{-8}$. В случае слабосвязанных систем с $D_0 \lesssim 50$ мэВ (здесь NeXe^+) относительная эффективность резонансного захвата снижается. Он вносит существенный вклад в заселение уровней с $n \lesssim 15$ лишь при низких степенях ионизации $\kappa \lesssim 10^{-8}$. При этом нерезонансный трехчастичный захват в столкновениях с электронами (1.1) следует учитывать при всех значениях n .

Осуществлены расчеты и проведен сравнительный анализ эффективности процессов диссоциативного захвата (3.1) электронов в ридберговские состояния атомов ксенона слабосвязанными, NeXe^+ , умеренно-связанными, ArXe^+ и KrXe^+ , и сильносвязанными, Xe_2^+ , молекулярными ионами. Показано, что эффективная область захвата электронов в случае гомоядерного иона Xe_2^+ смещена в сторону низколежащих уровней $n < 8$ по сравнению со случаем гетероядерных систем. Установлено, что влиянием канала диссоциативной рекомбинации иона Xe_2^+ при заселении ридберговских уровней $n \geq 8$ можно пренебречь в том случае, если концентрация $[\text{Xe}_2^+]$ хотя бы на порядок меньше концентрации $[\text{RgXe}^+]$. Представленные результаты имеют важное значение для работ по моделированию кинетики рекомбинационных и релаксационных процессов в неравновесной плазме смесей инертных газов и для выяснения механизма достижения инверсии заселенности мощного ксенонового лазера ИК диапазона.

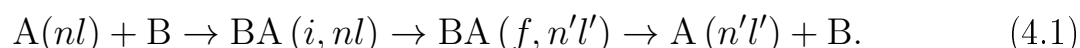
Чтобы проверить правомерность представленного здесь подхода, было выполнено сравнение результатов расчетов с экспериментальными, полуэмпирическими и высокоточными теоретическими данными по коэффициентам диссоциативной рекомбинации. Для гетероядерных ионов RgXe^+ с низкими D_0 доступны только полуэмпирические данные. Здесь представленные в диссертации расчеты дают близкие по величине значения коэффициентов, но несколько иную зависимость от электронной температуры T_e . В случае же гомоядерной си-

стемы Ar_2^+ результаты хорошо согласуются как с экспериментальными [85, 172], так и с теоретическими [113] данными за исключением области низких T_e . Здесь результаты диссертации согласуются с экспериментом, но в 3 раза превышают теоретические данные [113]. Для гомоядерного иона Ne_2^+ показано хорошее соответствие как с теоретическими [170], так и с экспериментальными [171] результатами.

Глава 4. Переходы между ридберговскими уровнями атомов при столкновениях с электронами и нейтральными частицами

4.1. Предварительные замечания

Наряду с процессами захвата электрона, в рекомбинирующей низкотемпературной плазме происходят также процессы столкновительного и радиационного девозбуждения ридберговских уровней. Самосогласованное решение задач об электрон-ионной рекомбинации и о каналах заселения ридберговских уровней требует также рассмотрения переходов между высоковозбужденными состояниями атомов [67, 177, 178]. В этой Главе будет исследована роль различных механизмов девозбуждения энергии электронного возбуждения в плазме смесей Ne/Xe и Ar/Xe. Значительное внимание будет уделено исследованию резонансного механизма тушения в результате переходов $n \rightarrow n'$ между возбужденными состояниями:



Как и резонансный трехчастичный захват (3.2), данный процесс протекает в результате резонансного неадиабатического перехода между термами квази-молекулярного иона BA^+ , находящегося в начальном состоянии непрерывного спектра по ядерному движению. По этой причине для теоретического анализа процесса (4.1) использовался подход, изначально развитый в работе [14] и в своих основополагающих принципах аналогичный подходу, используемому в Главе 3 при анализе резонансных процессов захвата (3.1) и (3.2).

В ряде случаев результирующая эффективность заселения возбужденных состояний атомов может помимо резонансного и нерезонансного каналов захвата электрона ионом определяться различными нерезонансными механизмами

неупругих связанно–связанных переходов $n \rightarrow n'$, вызванных столкновениями с атомами буферного газа. Поэтому ниже в этой Главе будут также представлены аналитические и полуаналитические выражения для сечений и констант скоростей нерезонансного механизма переходов между высоковозбужденными уровнями при столкновениях с нейтральными атомами В буферного газа



Указанный механизм, наряду с родственным механизмом 2.1 нерезонансного трехчастичного захвата, вносит значительный вклад в заселение высоковозбужденных состояний атома при невысоких степенях ионизации плазмы.

При высоких степенях ионизации плазмы основными каналами переходов между ридберговскими уровнями являются переходы, индуцированные столкновениями со свободными электронами плазмы



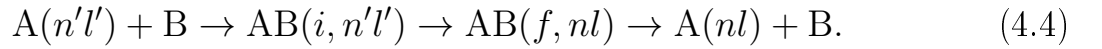
В этой главе будут представлены формулы, необходимые для расчетов сечений и констант скоростей связанно-связанных нерезонансных переходов электрона $n \rightarrow n'$ при столкновениях высоковозбужденного атома $A(n)$ с электронами и нейтральными частицами (процессы (4.3) и (4.2))

Основная задача, рассмотренная в данной главе, состоит в сравнении процесса (4.1) резонансных связанно-связанных переходов $n \rightarrow n'$ с близкими ему резонансными процессами захвата (3.1) и (3.2), а также с традиционными процессами (4.2) и (4.3) переходов $n \rightarrow n'$ при столкновениях с частицами В или е. Конкретные результаты расчетов будут приведены для сечений и констант скоростей резонансного девозбуждения ридберговских уровней атома Хе(n) атомами буферного инертного газа Не и Аг. Это позволит создать более полную картину о роли резонансных неадиабатических свободно-связанных $\varepsilon \rightarrow n$ и связанно-связанных $n \rightarrow n'$ переходов электрона в плазме смесей инертных газов. Отметим, что для окончательного установления влияния рассматриваемых процессов на эффективность электрон-ионной рекомбинации необходимо составление и решение сложных многоканальных кинетических моделей, что само по себе является основанием для отдельной работы. В упрощенном виде анализ был осуществлен в статье [15] при расчете коэффициента рекомбинации в плазме смесей инертных газов. Однако, ряд важных выводов о роли тех или иных механизмов столкновительного тушения может быть сделан в результа-

те оценок на основе анализа поведения констант скоростей соответствующих реакций. Именно данному анализу и посвящена Глава 4.

4.2. Сечение и константа скорости неадиабатического перехода $n \rightarrow n'$ между ридберговскими уровнями атома

Неупругое девозбуждение $n \rightarrow n'$ ридберговских уровней атомов Хе(nl) при столкновениях с атомами буферного инертного газа Rg, происходящее в результате неадиабатического перехода между термами квазимолекулярного иона (см. Рис. 3.1), может быть схематически описано реакцией:



Исходная формула для расчета сечения такого процесса, происходящего в рамках изучаемого здесь резонансного процесса, имеет вид [14]:

$$\sigma_{n \rightarrow n'} = \tilde{g}_q \frac{4\pi^3}{n^2 q^2} \sum_J (2J+1) \sum_{ll'} \sum_{mm'} \left| \left\langle \chi_{EJ}^{(i)}(R) \left| \mathbf{V}_{i,nlm}^{f,n'l'm'}(R) \right| \chi_{E'J}^{(f)}(R) \right\rangle \right|^2 \quad (4.5)$$

где $q^2 = 2\mu E/\hbar^2$. Дальнейшие преобразования формулы для сечения (4.5), основанные на использовании квазиклассического приближения для расчета матричных элементов перехода, полностью аналогичны преобразованиям, представленным в разделе (3.3.1.) при выводе формул для сечения резонансного трехчастичного захвата. Указанные преобразования приводят к следующему выражению для $\sigma_{n \rightarrow n'}$:

$$\sigma_{n \rightarrow n'} = \frac{\tilde{g}_q}{\hbar} \sum_{ll'} \frac{2l+1}{n^2} \frac{4\pi R_\omega^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega) V_E} \Gamma_{nl \rightarrow n'l'}(R_\omega) \sqrt{1 - \frac{U_i(R_\omega)}{E}}. \quad (4.6)$$

где R_ω определяется из условия $\Delta U_{fi}(R_\omega) = \hbar\omega = Ry/(n'_*)^2 - Ry/(n_*)^2$ и различается для различных значений l ; $\Gamma_{nl \rightarrow n'l'}$ есть эффективный параметр связи, определяемый выражением:

$$\Gamma_{nl \rightarrow n'l'}(R_\omega) \equiv \frac{2\pi}{2l+1} \sum_{mm'} \left| \mathbf{V}_{i,nlm}^{f,n'l'm'} \right|^2 = \frac{2\pi}{2l+1} \sum_{mm'} \frac{2Ry}{(n_*)^3} \left| \mathbf{V}_{i,\varepsilon lm}^{f,n'l'm'} \right|^2. \quad (4.7)$$

Здесь $\mathbf{V}_{i,\varepsilon lm}^{f,n'l'm'}$ рассчитывается аналогично представленному в предыдущем разделе.

Константа скорости неупругих переходов $K_{n \rightarrow n'}^r$ получается интегрированием по функции распределения скоростей ядер V_E : $K_{n \rightarrow n'}^r = \langle V_E \sigma_{n \rightarrow n'} \rangle_T$. В случае

Максвелловского распределения уравнение для $K_{n' \rightarrow n}^r$ принимает вид:

$$\begin{aligned} K_{n \rightarrow n'}^r &= \frac{\tilde{g}_q}{\hbar} \sum_{l'} \frac{2l+1}{n^2} \frac{4\pi R_\omega^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \Gamma_{nl \rightarrow n'l'}(R_\omega) \\ &\times \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty d\left(\frac{E}{k_B T}\right) e^{-\frac{E}{k_B T}} \sqrt{\frac{E}{k_B T} - \frac{U_i(R_\omega)}{k_B T}} \\ &= \frac{\tilde{g}_q}{\hbar} \sum_{l'} \frac{2l+1}{n^2} \frac{4\pi R_\omega^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \Gamma_{nl \rightarrow n'l'}(R_\omega) a^q(R_\omega). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Здесь $a^q(R_\omega)$ определяется формулой

$$a^q(R_\omega) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{k_B T}\right) \Theta_T^q(R_\omega). \quad (4.9)$$

в которой безразмерный фактор $\Theta_T^q(R_\omega)$ имеет тот же самый вид, как и в случае трехчастичного резонансного захвата (см. формулу (3.37)).

При использовании вакансионной модели, представленной в разделе 3.5. Главы 3, эффективный параметр связи для связанно-связанного перехода электрона определяется выражением [14]:

$$\Gamma_{nl \rightarrow n'l'} = \frac{4\pi}{25(2l+1)} \frac{\gamma_{l'}}{n_*^3(n'_*)^3}. \quad (4.10)$$

Итоговое выражение для эффективной константы скорости тушения $K_n^{\text{eff}}(T)$, необходимое для определения вклада неупругих переходов в кинетику релаксации энергии электронного возбуждения по уровням в процессе рекомбинации, получается в результате суммирования величины $K_{m \rightarrow k}$ по начальным n и конечным $k < n$ уровням [178]:

$$K_n^{\text{eff}}(T) = \sum_{k < n} K_{n \rightarrow k}^r \quad (4.11)$$

4.3. Нерезонансные переходы $n \rightarrow n'$ при столкновениях с атомами

Хотя традиционные процессы (4.3) и (1.4) не являются объектом исследования данной работы, они, однако, рассматриваются в Главе 4 в рамках сравнительного анализа различных каналов заселения ридберговских уровней. По этой причине в двух следующих далее разделах будут приведены подходы и формулы, используемые в данной работе для расчета сечений и констант скоростей процессов (4.3) и (1.4).

Ниже приведены общие и приближенные формулы для сечений и констант скоростей неупругих переходов между ридберговскими уровнями атома при столкновениях с атомными частицами (4.2), полученные в рамках модели квазисвободного электрона. Согласно [16] исходная формула для сечения нерезонансного перехода $n \rightarrow n'$ связана с соответствующим выражением (2.2) импульсного приближения для дифференциального сечения процесса прямой ионизации соотношением

$$\sigma_{n \rightarrow n'} \rightarrow \frac{d\sigma_{n \rightarrow \varepsilon}^{\text{di}}}{d\varepsilon} \left| \frac{d\varepsilon_{n'}}{dn'} \right| = \frac{d\sigma_{n \rightarrow \varepsilon}^{\text{di}}}{d\varepsilon} \frac{2Ry}{(n')^3}. \quad (4.12)$$

Таким образом, сечение и константа скорости нерезонансного перехода $n \rightarrow n'$ могут быть рассчитаны по формуле [16]

$$\sigma_{n \rightarrow n'} = \frac{\pi v_0^2}{(n')^3 V^2} \int_{Q_1}^{Q_2} dQ \int_{|\kappa_0(Q)|}^{\infty} \kappa d\kappa |g_n(\kappa)|^2 \times [f_{eB}(\kappa, Q)]^2, \quad K_{n \rightarrow n'}(T) = \langle V \sigma_{n \rightarrow n'} \rangle_T \quad (4.13)$$

с помощью выражений (2.6) и (2.8)–(2.10) для функции распределения импульсов электрона в состоянии с главным квантовым числом n и для амплитуды рассеяния электрона на атоме В. Пределы интегрирования в (4.13) определяются выражениями (2.3) и (2.4), в которых, величина передачи энергии $\Delta\varepsilon = \varepsilon + |\varepsilon_n|$ заменяется на $\Delta\varepsilon_{n'n} = \hbar\omega_{n'n} = \varepsilon_{n'} - \varepsilon_n \approx 2Ry\Delta n/n^3$.

Если далее приближенно положить $\kappa_0 \approx Q/2$, $Q_1 \approx |\Delta\varepsilon_{n'n}|/\hbar V$ и $Q_2 \rightarrow \infty$, то в приближении длины рассеяния ($f_{eB} = -L$) из (4.13) следует простая формула для сечения нерезонансного перехода (2.1):

$$\sigma_{n \rightarrow n'} = \frac{2\pi L^2 v_0^2}{(n')^3 V^2} F_{n'n}(\lambda), \quad \lambda = \frac{na_0 |\Delta\varepsilon_{n'n}|}{\hbar V} \quad (4.14)$$

$$F_{n'n}(\lambda) = \frac{2}{\pi} \left[\arctan \left(\frac{2}{\lambda} \right) - \frac{2\lambda(3\lambda^2 + 20)}{3(4 + \lambda^2)^2} \right],$$

полученная различными методами в [49, 50, 179].

Константа скорости девозбуждения, $K_{n \rightarrow n'}(T)$, при максвелловском распределении по скоростям $V = (2E/\mu)^{1/2}$ определяется формулой [49]:

$$K_{n \rightarrow n'}(T) = \langle V \sigma_{n \rightarrow n'} \rangle_T = \frac{4\pi L^2 v_0^2}{\pi^{1/2} V_T n^3} \Phi_{n'n}(\lambda_T)$$

$$\Phi_{n'n}(\lambda_T) = \exp \left(\frac{\lambda_T^2}{8} \right) \left[\exp \left(\frac{\lambda_T^2}{8} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{\lambda_T}{2} \right) - \frac{\lambda_T^2}{(2\pi)^{1/2}} D_{-3} \left(\frac{\lambda_T}{\sqrt{2}} \right) - \frac{5\lambda_T}{\pi^{1/2}} D_{-5} \left(\frac{\lambda_T}{\sqrt{2}} \right) \right], \quad (4.15)$$

где $D_{-\nu}(z) \equiv U(\nu - 1/2, z)$ – функция Вебера параболического цилиндра, erfc – интеграл вероятности [180], $\lambda_T = na_0\omega_{n'n}/V_T$, а $V_T = (2k_B T/\mu)^{1/2}$. Константа скорости возбуждения (переход $n' \rightarrow n$, $n > n'$) определяется из соотношения детального баланса:

$$K_{n' \rightarrow n} = (n/n')^2 K_{n \rightarrow n'} \exp(-|\Delta\varepsilon_{n'n}|/(k_B T)) \quad (4.16)$$

4.4. Переходы $n \rightarrow n'$ между ридберговскими уровнями атома в столкновениях с электронами

Отношение эффективностей девозбуждения ридберговских n -уровней в результате неупругих переходов $n \rightarrow n'$ при столкновениях со свободными электронами (4.3) в сравнении с их резонансным девозбуждением атомами В пропорционально степени ионизации плазмы

$$\frac{W_n^e}{W_n^B} = \varkappa \frac{K_n^e(T_e)}{K_n^B(T)} = \frac{\tilde{K}_n^e(T_e)}{K_n^B(T)}, \quad (4.17)$$

где $\tilde{K}_n^e(T_e) = \varkappa K_n^e(T_e)$ – относительная константа скорости неупругого тушения (4.2).

Для константы скорости, $K_{n \rightarrow n'}^e(T_e)$, перехода $n \rightarrow n'$, сопровождаемого девозбуждением электрона с $n > n'$, будем использовать квазиклассическую формулу (см. (8.30) в [16])

$$\begin{aligned} K_{n \rightarrow n'}^e(T_e) &= \langle v_\varepsilon \sigma_{n \rightarrow n'}^e \rangle = \langle v_\varepsilon \sigma_{n \rightarrow n'}^{\text{Born}} \rangle f_\vartheta(\Delta n, n'), \quad (4.18) \\ \langle v_\varepsilon \sigma_{n \rightarrow n'}^{\text{Born}} \rangle &= \frac{16\pi a_0^2 v_0}{n^2 \sqrt{\pi}} \left(\frac{Ry}{k_B T_e} \right)^{1/2} \left\{ \left(1 - \frac{0.25}{\Delta n} \right) \right. \\ &\times \frac{|\varepsilon_n \varepsilon_{n'}|^{3/2} Ry}{(\Delta\varepsilon)^4} \varphi \left(\frac{|\varepsilon_{n'}|}{k_B T_e} \right) + \left(1 - \frac{0.6}{\Delta n} \right) \frac{|\varepsilon_n|^{3/2} \sqrt{Ry}}{(\Delta\varepsilon)^2} \\ &\left. \times \left(\frac{4}{3\Delta n} + (n')^2 \right) \left[1 - \frac{|\varepsilon_{n'}|}{k_B T_e} \varphi \left(\frac{|\varepsilon_{n'}|}{k_B T_e} \right) \right] \right\}, \quad (4.19) \end{aligned}$$

записанную в виде борновского выражения, умноженного на фактор:

$$f_\vartheta(\Delta n, n) = \frac{\ln \left(1 + (n\sqrt{\vartheta}/\Delta n) / \left[1 + c / \left(\Delta n \sqrt{\vartheta} \right) \right] \right)}{\ln \left(1 + n\sqrt{\vartheta}/\Delta n \right)}.$$

Здесь $|\varepsilon_n| = Ry/n^2$, $|\varepsilon_{n'}| = Ry/(n')^2$, $\Delta\varepsilon = |\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}|$, $\Delta n > 0$, $\varphi(x) = -e^x \text{Ei}(-x)$, $c = 2.5$ и $\vartheta = k_B T_e / Ry$.

4.5. Сравнение эффективностей резонансных механизмов тушения и захвата электронов на ридберговские уровни

Рассмотрим сначала, как соотносятся между собой резонансные процессы тушения и захвата электрона при столкновениях с атомами буферного газа. Реакции (3.2) и (4.1) отличаются тем, что в первом случае электрон исходно находится в непрерывном спектре, а во втором — в дискретном. По этой причине сечения этих реакций имеют разные размерности, что лишает возможности провести прямое количественное сравнение эффективности указанных процессов. В данной работе, однако, были проведены сравнительные расчеты сечений резонансных связанно-связанных переходов $n \rightarrow n'$ и трехчастичных процессов захвата, нормированных на свои значения в максимуме: $\sigma_{n \rightarrow n-\Delta n}^{\text{res}} / (\sigma_{n \rightarrow n-1}^{\text{res}})_{\text{max}}$ и $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{tr}} / (\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{tr}})_{\text{max}}$. Такой подход позволяет провести качественное сравнение резонансных механизмов трехчастичного захвата и тушения установить их характерные „рабочие“ области по n . Результаты расчетов нормированных сечений процессов (4.1) и (3.2) приведены на рисунках 4.1a и 4.1b, соответственно. Расчеты, проводившиеся для столкновительной системы $\text{Ne}+(\text{Xe}^+ + e)$ при энергии относительного движения $E=k_{\text{B}}T/2$, $T=300$ К и различных значениях энергии электронов $\varepsilon = k_{\text{B}}T_e/2$ ($T_e=500, 1000$ и 1500 К), приведены на рис. 4.1b.

Из рис. 4.1a видно, что для каждого значения Δn сечение девозбуждения $\sigma_{n \rightarrow n-\Delta n}^{\text{res}}(E)$ имеет ярко выраженный максимум; при этом преобладают переходы $n \rightarrow n-1$ с $\Delta n=1$. Максимумы сечений связанно-связанных переходов, $\sigma_{n \rightarrow n-\Delta n}^{\text{res}}(E)$, существенно сдвинуты в сторону низких уровней n по сравнению с максимумами сечений захвата $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{tr}}(E)$. В обоих случаях положения максимумов определяются из условия, что переходы между термами происходят вблизи положения равновесия, R_e , то есть $\Delta U_{fi}(R_e) \approx \varepsilon + Ry/n^2$ и $\Delta U_{fi}(R_e) \approx 2Ry\Delta n/n^3$ для переходов $\varepsilon \rightarrow n$ и $n \rightarrow n-1$, соответственно. При фиксированной величине $\Delta U_{fi}(R_e)$ второе условие выполняется при меньших n , что и приводит к смещению максимума. Заметим, что характерные области преимущественного резонансного захвата и тушения пересекаются. Это явно указывает на необходимость одновременного учета данных процессов при построении кинетических моделей рекомбинации в рассматриваемых системах.

Сравним скорости образования ридберговского атома ксенона $\text{Xe}(n)$ в результате резонансных процессов трехчастичного захвата $\varepsilon \rightarrow n$ (3.2) и связанно-связанных переходов $n' \rightarrow n$ (4.1). Они описываются величинами $W_n^{\text{res}} = \beta_n^{\text{res}} N_{\text{B}} N_e$

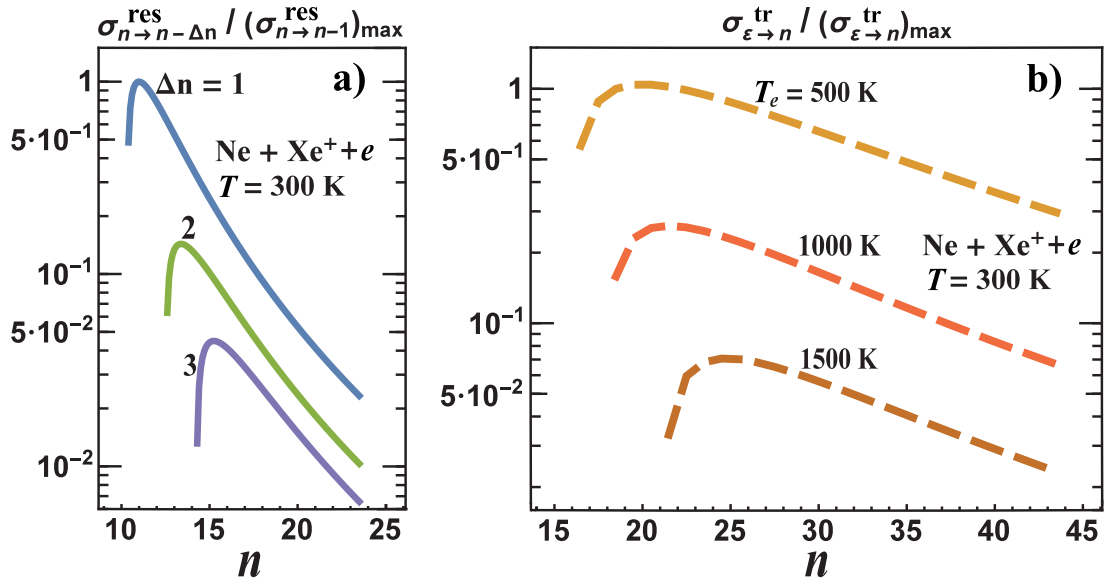


Рис. 4.1: (a): нормированные сечения $\sigma_{n \rightarrow n-\Delta n}^{\text{res}} / (\sigma_{n \rightarrow n-1}^{\text{res}})_{\text{max}}$ резонансного тушения ридберговских уровней $\text{Xe}(n)$ атомами Ne при $\Delta n = 1, 2$ и 3 . (b): нормированные сечения $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{tr}} / (\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{tr}})_{\text{max}}$ резонансного захвата электронов в столкновениях $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ при энергии электронов $\varepsilon = k_B T_e / 2$ ($T_e = 500, 1000$ и 1500 K). Энергия столкновения частиц Ne и Xe^+ равна $E = k_B T / 2$ ($T = 300$ K).

$[\text{c}^{-1}]$ и $W_n^{\text{q}} = \sum_{n' > n} K_{n' \rightarrow n}^{\text{q}} N_{n'}$ $[\text{c}^{-1}]$, где $K_{n' \rightarrow n}^{\text{q}} = \langle V \sigma_{n' \rightarrow n}^{\text{res}} \rangle_T$ $[\text{cm}^3 \cdot \text{c}^{-1}]$. В случае равновесного заселения ридберговских уровней скорость резонансного тушения W_n^{q} может быть записана в виде $W_n^{\text{q}} = \beta_n^{\text{q}} N_{\text{B}} N_e$, где $\beta_n^{\text{q}} = \sum_{n' > n} K_{n' \rightarrow n}^{\text{q}} N_{n'} / (N_{\text{B}} N_e)$ $[\text{cm}^3 \cdot \text{c}^{-1}]$, а отношение $N_{n'} / (N_{\text{B}} N_e)$ рассчитывается с использованием формулы Саха. Тогда анализ эффективности заселения уровня n за счет резонансного захвата и тушения сводится к сопоставлению величин β_n^{res} и β_n^{q} .

Зависимости рассматриваемых динамических величин от главного квантового числа n представлены на рис. 4.2 для столкновительных систем $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ при температурах $T = 300$ и 500 K и $T_e = 2000$ K. Из рисунка видно, что в системах с умеренными значениями энергии диссоциации, D_0 , молекулярных ионов (как у ArXe^+) резонансный захват гораздо эффективнее способствует заселению уровней n , что обусловлено высокой концентрацией катионов VA^+ , играющих ключевую роль в процессе диссоциативной рекомбинации. При увеличении газовой температуры T эта концентрация падает, что приводит к снижению относительной эффективности резонансного процесса захвата. Иным образом складывается ситуация в случае слабосвязанных систем (как NeXe^+). Из-за низкой вероятности формирования ионов VA^+ влияние канала диссоциативной рекомбинации мало, и динамика заселения ридберговских уровней n преимущественно определяется резонансными столкновительными процессами захвата (3.2) и тушения (4.1) с участием нейтральных частиц V . Процесс резо-

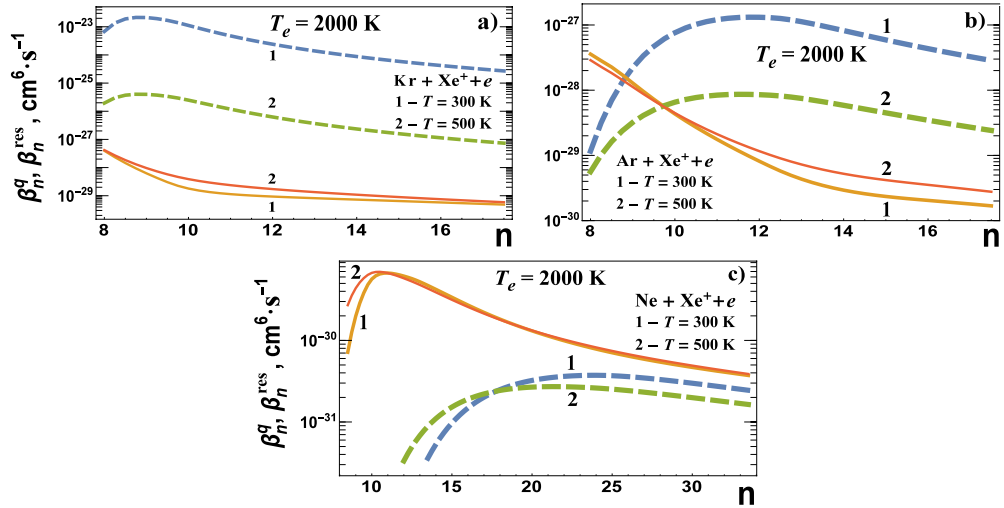


Рис. 4.2: Константа скорости, β_n^{res} , резонансного захвата электрона на уровень n (штриховые кривые) и эффективная константа скорости резонансного тушения $\beta_n^q = \sum_{n' > n} K_{n' \rightarrow n}^q (N_{n'}) / (N_B N_e)$ (сплошные кривые) для систем $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ (а) и $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ (б) при температурах $T = 300$ и 500 K и $T_e = 2000 \text{ K}$.

нансного тушения оказывается более сильным по причине большего статистического веса связанных состояний атома A , а эффективность обоих процессов слабо зависит от T .

Таким образом, в системах $B + A^+$ с высокими D_0 доминирует процесс резонансного захвата, тогда как в системах с низкими D_0 преобладает процесс резонансного тушения. Отметим, что результаты расчетов, на основании которых сделаны данные выводы, получены из предположения о том, что квазиконтинuum всех возбужденных уровней атома ксенона находится в равновесии с непрерывным спектром. В общем случае, при учете различных механизмов захвата и связанно-связанных переходов, данное предположение далеко не всегда обоснованно. Более точный сравнительный анализ эффективности резонансных механизмов захвата и тушения требует рассмотрения кинетики рекомбинации.

4.6. Роль резонансных и нерезонансных механизмов тушения ридберговских уровней атома

Проанализируем эффективность процесса (4.1) резонансного девозбуждения $n \rightarrow n'$, происходящего вследствие переходов между электронными термами $i \rightarrow f$ квазимолекулярного иона BA^+ , в сравнении с процессами нерезонансного тушения, обусловленными рассеянием слабосвязанного электрона на атоме и на свободном электроном. На рис. 4.3 представлены зависимости от n се-

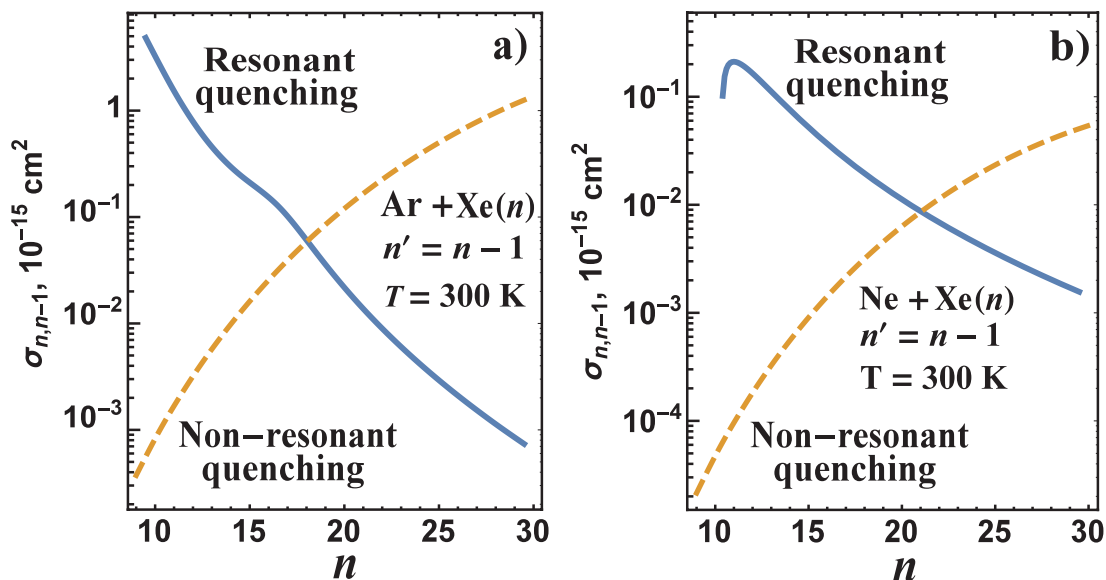


Рис. 4.3: Сечения девозбуждения ридберговских уровней атома $\text{Xe}(n)$ при столкновениях ($E=k_{\text{B}}T/2$, $T=300$ К) с атомами Ar (a) и Ne (b). Сплошные и штриховые кривые – резонансный и нерезонансный механизмы переходов $n \rightarrow n - 1$, соответственно.

чений резонансных и нерезонансных переходов $n \rightarrow n'$ для систем $\text{Ar} + \text{Xe}(n)$ и $\text{Ne} + \text{Xe}(n)$ при энергии столкновения $E=k_{\text{B}}T/2$, $T=300$ К. Приведенные результаты демонстрируют качественные различия в поведении кривых. Вероятность нерезонансных связанно-связанных переходов оказывается тем выше, чем ниже энергия перехода, и соответствующие сечения растут с увеличением n . Напротив, эффективность резонансного тушения ограничена рабочей областью низких уровней и быстро убывает по мере роста главного квантового числа (в соответствии с рис. 4.1). Максимум сечения $\sigma_{n \rightarrow n-1}^{\text{res}}(E)$ по n находится за пределами рассматриваемых значений главного квантового числа и потому не изображен на рис. 4.3а. Сечения резонансного и нерезонансного механизмов переходов $n \rightarrow n - 1$ становятся близкими при $n \sim 18$. Для обеих систем $\text{Ar} + \text{Xe}(n)$ и $\text{Ne} + \text{Xe}(n)$ указанная область n находится достаточно далеко от положения максимума сечений $\sigma_{n \rightarrow n-1}^{\text{res}}(E)$. Это значит, что при рассмотрении динамики заселения низколежащих ридберговских уровней атомов инертных газов влиянием нерезонансного механизма тушения в рабочей области переходов $n \rightarrow n-1$, как правило, можно пренебречь. Исключением является случай слабосвязанных ионов с малой приведенной массой и существенной длиной рассеяния атома В.

Для сравнительного анализа эффективности процессов столкновительного девозбуждения состояний $\text{Xe}(n)$ свободными электронами и процессов резонансного и нерезонансного тушения атомов ксенона при столкновениях с атома-

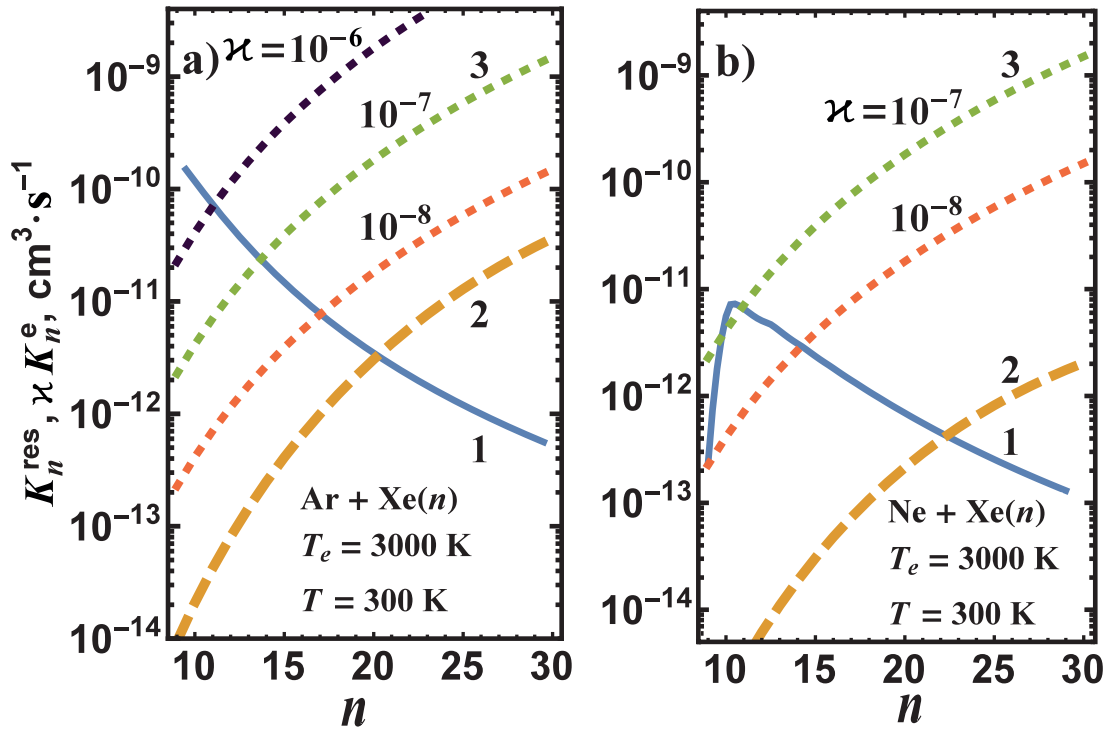


Рис. 4.4: Константы скорости тушения ридберговских уровней, $K_n^{\text{q}}(T) = \sum_{n' < n} K_{n \rightarrow n'}(T)$, атомов $\text{Xe}(n)$ в столкновениях с атомами Ar (а) и Ne (б) и со свободными электронами в плазме с температурами $T=300 \text{ K}$, $T_e=3000 \text{ K}$ и степенями ионизации $\kappa=10^{-7}$, 10^{-8} . Сплошные кривые 1 – константы скорости K_n^{q} резонансного тушения при столкновениях с атомами буферного газа. Штриховые кривые 2 – константы скорости традиционного, нерезонансного тушения (4.13) при столкновениях с нейтральными частицами. Пунктирные кривые 3 – относительные константы скорости $\widetilde{K}_n^e = \sum_{n' < n} K_{n \rightarrow n'}^e(T_e) \kappa$ тушения в столкновениях с электронами (4.19).

ми буферного газа ($B=Ne, Ar$) необходимо сопоставить соответствующие вероятности $W_n^e = K_n^e N_e [c^{-1}]$ и $W_n^B = K_n^B N_B [c^{-1}]$ при различных степенях ионизации плазмы $\varkappa = N_e / N_B$. Здесь $K_n^B = \sum_{n' < n} \langle V \sigma_{n \rightarrow n'}^B \rangle_T$ и $K_n^e = \sum_{n' < n} \langle v_e \sigma_{nn'}^e \rangle_{T_e}$ есть полные константы скорости тушения при столкновениях с нейтральными частицами и свободными электронами, соответственно. Результаты расчетов величины K_n^B представлены на рис. 4.4. Помимо процессов резонансного и нерезонансного тушения в столкновениях с частицами B , рис. 4.4 содержит относительные константы скорости $\widetilde{K}_n^e = \varkappa \sum_{n' < n} \langle v_e \sigma_{nn'}^e \rangle$ тушения $Xe(n)$ электронным ударом, характеризующие относительную эффективность канала тушения (4.19) при различных степенях ионизации плазмы \varkappa . Расчеты выполнены при газовой и электронной температурах $T=300$ К и $T_e=3000$ К. Как видно из рисунка 4.4, резонансное тушение вносит доминирующий вклад в заселение низких уровней n для обеих систем $Ar+Xe(n)$ и $Ne+Xe(n)$. Следовательно, для самосогласованного описания динамики заселения низких ридберговских состояний в плазмах с низкой степенью ионизации ($\varkappa \lesssim 10^{-7}$) необходим корректный учет процессов резонансного тушения. При высоких n основной вклад в тушение дают переходы, вызванные столкновениями со свободными электронами. Нерезонансное тушение (4.2) в тройных столкновениях с атомами B играет значительную роль лишь при больших n и $\varkappa \leq 10^{-8}$.

Как видно из рисунков (4.3) и (4.4), традиционные механизмы переходов между ридберговскими уровнями при столкновениях с нейтральными частицами или электронами протекают тем эффективнее, чем выше главное квантовое число n , в то время как резонансный процесс (4.1) наиболее эффективен в ограниченной области низколежащих ридберговских уровней. Аналогичная картина наблюдалась ранее при сравнительном анализе резонансного трехчастичного захвата (3.2) с традиционными процессами (2.1) и (1.1).

4.7. Заключительные замечания

Проведен анализ эффективностей разных каналов (4.3), (4.2) и (4.1) связанных переходов $n \rightarrow n'$ между ридберговскими состояниями атома $Xe(n)$. Показано, что при резонансном девозбуждении в основном преобладают переходы $n \rightarrow n - 1$. Сечения и константы скорости таких переходов имеют ярко выраженный максимум по n для всех рассмотренных систем. Этот максимум смещен в сторону более низких уровней по сравнению с максимумом сечений

процессов захвата (3.1) и (3.2).

Анализ процессов (4.3), (4.2) и (4.1) показал, что учет влияния резонансных переходов $n \rightarrow n'$ принципиален для описания процессов заселения низких ридберговских уровней $n \lesssim 15$. С другой стороны, на заселение возбужденных уровней с $n \gtrsim 20$ главным образом влияют традиционные механизмы переходов $n \rightarrow n'$ при столкновениях со свободными электронами или нейтральными атомами. Соотношение между эффективностями таких переходов определяется величинами κ , T_e и T .

Представленные в Главах 3 и 4 результаты указывают на принципиально различный характер протекания рекомбинационных процессов в результате резонансных процессов (3.1), (3.2), (4.1) и традиционных нерезонансных процессов (1.1), (2.1), (4.2) и (4.3). При наличии нерезонансных переходов в столкновениях с атомными нейтральными частицами или со свободными электронами рекомбинация носит явно выраженный диффузионный характер: электроны заселяют в основном высоковозбужденные состояния атомов $\text{Xe}(n)$, после чего происходят преимущественные связанно-связанные многоступенчатые переходы между соседними уровнями $n \rightarrow n \pm 1$. Заселение низколежащих уровней происходит лишь после того, как электроны покинут квазиконтинуум высоковозбужденных состояний, известный как „горлышко стока“.

Иная ситуация наблюдается в случае реализации резонансных процессов диссоциативной рекомбинации (3.1), трехчастичного захвата (3.2) и тушения (4.1): происходит преимущественное заселение ограниченного числа низколежащих ридберговских уровней с последующим переходом вниз. Таким образом, резонансные неадиабатические переходы с большими передачами энергии позволяют избежать диффузионных многоступенчатых переходов в квазиконтинууме высоковозбужденных ридберговских состояний и сразу перескочить на низкие уровни.

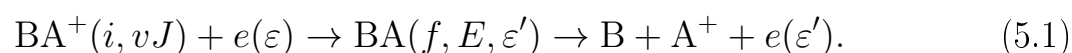
Обнаруженный эффект имеет принципиальное значение при исследовании динамики заселения отдельных слабозвозбужденных уровней с приложениями к ряду задач атомной спектроскопии и к выяснению механизмов формирования инверсной заселенности в лазерах на инертных газах с оптической накачкой или в инфракрасных ксеноновых лазерах на смесях Rg/Xe. Более того, этот эффект необходимо учитывать в кинетике рекомбинации и релаксации энергии электронного возбуждения, поскольку он может приводить к многократному усилению скорости рекомбинационных процессов и увеличению на порядки ве-

личин результирующих коэффициентов рекомбинации в лабораторной низкотемпературной плазме (см. [15]). Наконец, полученные в Главах 3 и 4 результаты представляют большой интерес для моделирования кинетики рекомбинационных процессов в барьерных разрядах [2], эксимерных лампах и источниках вакуумного ультрафиолетового излучения [181, 182], а также в активных средах мощных газовых лазеров [183, 184] и микроплазменных ячейках [185].

Глава 5. Резонансное диссоциативное возбуждение гомоядерных и гетероядерных ионов инертных газов электронными ударом

5.1. Вводные замечания

Данная глава посвящена теоретическому исследованию резонансного процесса диссоциативного возбуждения молекулярных ионов электронным ударом:



Здесь ε и ε' — это начальная и конечная энергии электронов, vJ — начальное колебательно-вращательное состояние ионов BA^+ , а E — конечная энергия относительного движения ядер. Подобно диссоциативной рекомбинации (3.1), при резонансном процессе (5.1) диссоциация происходит в результате обмена энергии внешнего электрона и внутренних электронов оболочки иона BA^+ . Отличие двух данных процессов состоит в том, что в конечном канале реакции (5.1) электрон находится не в связанном, а свободном состоянии. Для теоретического описания процесса (5.1) используется та же модель, что и для описания диссоциативной рекомбинации (3.1); согласно этой модели, реакция (5.1) сопровождается резонансным неадиабатическим переходом между электронными термами $U_i(R)$ и $U_f(R)$ (квази-)молекулярного иона BA^+ (схема процесса представлена на рис. 5.1).

В рамках этой Главы будет представлен оригинальный теоретический подход для расчета сечений $\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon)$ [см²] и констант скоростей $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ [см³/с] диссоциативного возбуждения молекулярных ионов инертных газов. Как и при теоретическом описании диссоциативной рекомбинации (3.1), в основе подхода лежит использование квазиклассической версии теории неадиабатических переходов и приближения квазинепрерывного спектра колебательно-вращательных

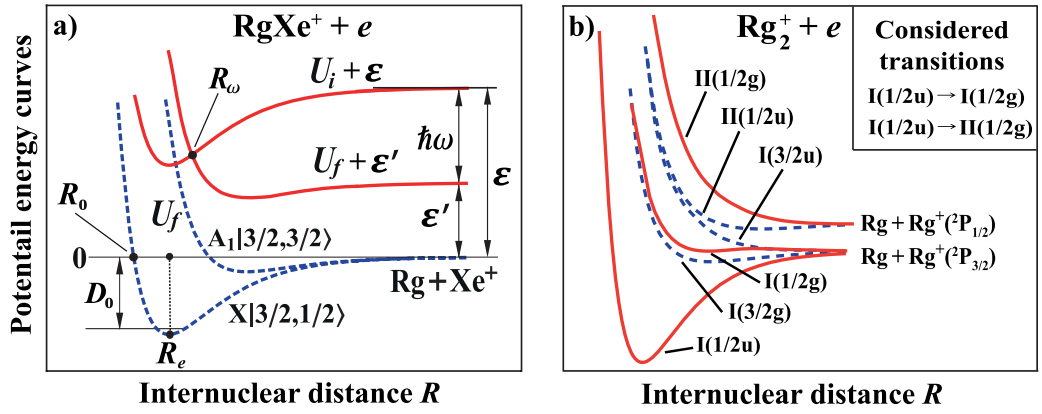


Рис. 5.1: (a) Схематическое изображение резонансного диссоциативного возбуждения ионов RgXe^+ электронным ударом в результате неадиабатических переходов между основным $X|j = 3/2, \Omega = 1/2\rangle$ и первым возбужденным термом $A_1|j = 3/2, \Omega = 3/2\rangle$. (b) Типичные потенциальные кривые гомоядерных ионов инертных газов Rg_2^+ с учетом спин-орбитального расщепления $\Delta_{j=3/2, j'=1/2}$ уровней ${}^2P_{3/2}$ и ${}^2P_{1/2}$ иона $\text{Rg}^+[n_0p^5({}^2P_j)]$ ($n_0 = 3$ и 5 для Ar^+ и Xe^+). Сплошные кривые – термы, участвующие в рассматриваемых переходах.

состояний vJ молекулярного иона VA^+ (A_2^+). Реализация указанного подхода дает возможность проводить расчеты сечений и констант скоростей процесса (5.1) в гораздо более широком диапазоне температур T и T_e по сравнению с ранее разработанными теоретическими моделями.

В этой Главе будут приведены результаты конкретных расчетов динамических характеристик диссоциации электронным ударом гетероядерных молекулярных ионов инертных газов NeXe^+ и ArXe^+ и гомоядерных ионов Ar_2^+ и Xe_2^+ . Таким образом, будут рассмотрены случаи катионов с разными энергиями диссоциации: слабосвязанных ($D_0(\text{NeXe}^+) = 33$ meV), умеренносвязанных ($D_0(\text{ArXe}^+) = 171$ meV) и сильносвязанных ($D_0(\text{Ar}_2^+) = 1.19$ eV, $D_0(\text{Xe}_2^+) = 0.97$ eV). Отметим, что в случае гомоядерных ионов, ввиду большого диапазона рассматриваемых электронных температур, необходимо учитывать два рабочих типа неадиабатических переходов между термами: $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ (см. рис. 5.1). Газовая температура, в зависимости от рассматриваемых условий, варьируется в диапазоне $T \sim 100 \div 2000$ К, а электронная температура $T_e \sim 300 \div 70000$ К. Одна из ключевых задач, рассмотренных в данной Главе, состоит в исследовании зависимости сечений и констант скоростей диссоциативного возбуждения (5.1) от таких параметров, как температуры T и T_e , а также от параметров термов $U_i(R)$ и $U_f(R)$ молекулярных ионов, включая энергию диссоциации D_0 и положение равновесия R_e нижнего терма $U_i(R)$.

Еще одна важная задача, рассматриваемая в данной Главе, заключается в сравнительном анализе двух близких резонансных механизмов разрушения мо-

лекулярных ионов — диссоциативного возбуждения (5.1) и диссоциативной рекомбинации (3.1). Подобное сравнение представляет интерес, в частности, при исследовании кинетики плазмы атмосферного давления в рамках разработки лазеров с оптической накачкой на инертных газах. Сравнительный анализ будет осуществляться путем сопоставления коэффициентов диссоциативного возбуждения $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ и диссоциативной рекомбинации $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T) = \sum_{n \geq 8} \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$ на ридберговские уровни. Кроме того, в данной Главе будут приведены результаты расчета суммарного коэффициента резонансного разрушения ионов $\alpha^{\text{rd}}(T_e, T) = \alpha^{\text{de}}(T_e, T) + \alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ с учетом обоих механизмов. Кроме того, с целью демонстрации правомерности представленного в диссертации подхода, будут показаны результаты сравнения расчетов величины $\alpha^{\text{rd}}(T_e, T)$ с экспериментальными данными более ранних работ.

Наконец, в данной Главе будет рассмотрен вопрос о том, на какие характерные значения $\hbar\omega$ меняется энергия электронов в результате диссоциативного возбуждения и диссоциативной рекомбинации. С этой целью был развит оригинальный теоретический подход для расчета дифференциальных сечений и констант диссоциации ионов VA^+ электронным ударом, сопровождающимся передачей энергии в интервале $\hbar(\omega, \omega + d\omega)$. Анализ проводился для систем KrXe^+ , ArXe^+ и NeXe^+ при $T \sim 300 - 1000$ К и $T_e \sim 1000 - 20000$ К. Данное исследование представляет интерес, в частности, при рассмотрении задачи о влиянии резонансных процессов (5.1) и (3.1) на кинетику охлаждения плазмы смесей инертных газов.

5.2. Исходные уравнения

Базовое выражение для дифференциального сечения диссоциативного возбуждения молекулярных ионов в единичный интервал энергии относительного движения тяжелых частиц имеет вид

$$\frac{d\sigma_{E,vJ}^{\text{de}}(\varepsilon \rightarrow \varepsilon')}{dE} = \frac{4\pi^3 g_f}{k^2 g_i} \sum_{lm, l'm'} \left| \left\langle \chi_{vJ}^{(i)}(R) \left| V_{i,\varepsilon lm}^{f,\varepsilon' l'm'}(R) \right| \chi_{EJ}^{(f)}(R) \right\rangle \right|^2, \quad (5.2)$$

Здесь $\chi_{vJ}^{(i)}$ и $\chi_{EJ}^{(f)}$ — радиальные волновые функции ядерного движения в начальном и конечном состояниях, vJ — колебательно-вращательное состояние иона VA^+ , а E — энергия относительного движения тяжелых частиц A^+ и B в конечном канале. $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ и $\varepsilon' = \hbar^2 (k')^2 / 2m_e = \varepsilon - E - |E_{vJ}|$ — начальная и

конечная энергия налетающего электрона; $\hbar k$ — начальный импульс электрона. $g_f/g_i \equiv g_{de} = g_{BA^+(f)}/g_{BA^+(i)}$ — отношение статистических весов электронных состояний молекулярных ионов. Электронный матричный элемент определяется выражением

$$V_{i,\varepsilon lm}^{f,\varepsilon' l' m'}(\mathbf{R}) = \langle \psi_{\varepsilon' l' m'}(\mathbf{r}) | \langle \varphi_f(\mathbf{r}_k, \mathbf{R}) | V | \varphi_i(\mathbf{r}_k, \mathbf{R}) \rangle | \psi_{\varepsilon lm}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (5.3)$$

где $\psi_{\varepsilon lm}(\mathbf{r})$ и $\psi_{\varepsilon' l' m'}(\mathbf{r})$ — волновые функции налетающего электрона до и после столкновения, соответственно, а $\varphi_i(\mathbf{r}_k, \mathbf{R})$ и $\varphi_f(\mathbf{r}_k, \mathbf{R})$ — электронные волновые функции молекулярного иона BA^+ , соответствующие начальному, $U_i(R)$, и конечному, $U_f(R)$ электронным термам.

Далее мы введем эффективный параметр связи, $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R)$, в следующем виде:

$$\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R) = \sum_{lm, l' m'} \Gamma_{\varepsilon' l' m', \varepsilon lm}^{\text{de}}(R) \longrightarrow 2\pi \sum_{lm, l' m'} \left| V_{i,\varepsilon lm}^{f,\varepsilon' l' m'}(R) \right|^2. \quad (5.4)$$

Резонансная диссоциация электронным ударом, сопровождающаяся передачей энергии электрона $\hbar\omega = \varepsilon - \varepsilon'$, происходит преимущественно вблизи точки R_ω пересечения эффективных потенциальных кривых составной системы $BA^+ + e$:

$$U_i(R_\omega) + \hbar^2 k^2 / (2m_e) = U_i(R_\omega) + \hbar^2 (k')^2 / (2m_e) \quad (5.5)$$

Из определения R_ω следует, что в указанной точке передача энергии

$$\hbar\omega = \varepsilon - \varepsilon' = E + |E_{vJ}| \quad (5.6)$$

налетающего электрона равна разнице между термами $\Delta U_{fi}(R_\omega) = U_f(R_\omega) - U_i(R_\omega)$.

Далее применим квазиклассическое приближение для описания матричных элементов неадиабатических переходов. Выражение (5.2) приобретает вид

$$\frac{d\sigma_{E,vJ}^{\text{de}}(\varepsilon \rightarrow \varepsilon')}{dE} = \frac{2\pi^2 g_{\text{de}} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega)}{k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} R_\omega^2 |\chi_{vJ}(R_\omega)|^2, \quad (5.7)$$

где $\Delta F_{fi}(R) = |F_f - F_i|$ — разница наклонов, $F_k = -dU_k/dR$ ($k = i, f$), потенциальных кривых электронных термов молекулярного иона BA^+ .

Вводя функцию распределения по координатам

$$W_{vJ}(R) = \frac{1}{2J+1} \sum_{M=-J}^J |\psi_{vJM}(\mathbf{R})|^2 = \frac{1}{4\pi} |\chi_{vJ}(R)|^2, \quad (5.8)$$

$$\int_0^\infty W_{vJ}(R) 4\pi R^2 dR = 1$$

для молекулярного иона с заданными колебательными, v , и вращательными, J , квантовыми числами, перепишем выражение (5.7) в следующем виде:

$$\frac{d\sigma_{E,vJ}^{\text{de}}}{dE} = \frac{2\pi^2 g_{\text{de}}}{k^2} \frac{\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} W_{vJ}(R_\omega) 4\pi R_\omega^2. \quad (5.9)$$

Для получения выражения для полного сечения диссоциативного возбуждения молекулярного иона VA^+ в заданном vJ -задании необходимо провести интегрирование по энергии E , что приводит к следующей формуле:

$$\sigma_{vJ}^{(\text{d})}(\varepsilon) = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \frac{g_{\text{de}} 4\pi^3 \eta_{vJ}(R_\omega) \sqrt{2\mu} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega)}{T_{vJ} k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} dE \quad (5.10)$$

при $\varepsilon \geq |E_{vJ}|$ и $\sigma_{vJ}^{(\text{d})}(\varepsilon) = 0$ при $\varepsilon < |E_{vJ}|$. Верхние и нижние пределы интегрирования в формуле (5.10) определяются условиями

$$E_{\min} = 0, \quad E_{\max} = \varepsilon - |E_{vJ}|. \quad (5.11)$$

Используя формулу (5.6), изменим переменную интегрирования на $\hbar\omega$:

$$\sigma_{vJ}^{(\text{d})}(\varepsilon) = \int_{\hbar\omega_{\min}}^{\hbar\omega_{\max}} \frac{g_{\text{de}} 4\pi^3 \eta_{vJ}(R_\omega) \sqrt{2\mu} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega)}{T_{vJ} k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} d\hbar\omega, \quad (5.12)$$

где

$$\hbar\omega_{\min} = |E_{vJ}| \equiv \Delta U_{fi}(R_{vJ}), \quad \hbar\omega_{\max} = \varepsilon \equiv \Delta U_{fi}(R_\varepsilon). \quad (5.13)$$

С помощью соотношения $d(\hbar\omega) = \Delta F_{fi} dR_\omega$ выражение для сечения $\sigma_{vJ}^{(\text{d})}(\varepsilon)$ принимает следующий удобный вид:

$$\sigma_{vJ}^{\text{de}} = \frac{8\pi^3 g_{\text{de}}}{k^2} \int_{R_{\min}^{\text{de}}}^{R_{\max}^{\text{de}}} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) W_{vJ}(R_\omega) R_\omega^2 dR_\omega, \quad (5.14)$$

Здесь пределы интегрирования по R определены, как $R_{\min}^{\text{de}} = R_\varepsilon$ и $R_{\max}^{\text{de}} = R_{vJ}$. Заметим, что при использовании квазиклассического приближения для описания относительного движения ядер пределы интегрирования задаются равенствами $R_{\min}^{\text{de}} = \max\{R_\varepsilon, a_{vJ}^i\}$ и $R_{\max}^{\text{de}} = \min\{R_{vJ}, b_{vJ}^i\}$, где a_{vJ}^i и b_{vJ}^i являются левой и правой классическими точками поворота, соответствующими состоянию vJ при эффективной потенциальной энергии, $U_{\text{eff}}^{(J)}(R) = U_i(R) + \hbar^2(J + 1/2)^2 / (2\mu R^2)$; иначе говоря, $U_{\text{eff}}(a_{vJ}^i) = U_{\text{eff}}(b_{vJ}^i) = -|E_{vJ}|$, $a_{vJ}^i < b_{vJ}^i$. μ есть приведенная масса иона VA^+ .

Выражение для константы скорости, α_{vJ}^{de} , диссоциативного возбуждения молекулярного иона с заданного состояния vJ получается в результате усреднения величины $v_\varepsilon \sigma_{vJ}^{\text{de}}(\varepsilon)$ по функции распределения скоростей электронов. Для простоты дальнейшей записи введем обозначения для статистических весов свободных электронов в единице объема при электронной температуре T_e и для тяжелых частиц с приведенной массой μ при газовой температуре T :

$$g_{T_e} = \left(\frac{m_e k_B T_e}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}, \quad g_T = \left(\frac{\mu k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (5.15)$$

В случае распределения Максвелла, соответствующего электронной температуре T_e , получим выражение

$$\begin{aligned} \alpha_{vJ}^{\text{de}}(T_e) &= \frac{g_{\text{de}}}{\hbar g_{T_e}} \int_{|E_{vJ}|}^{\infty} \exp\left[-\frac{\varepsilon}{k_B T_e}\right] d\varepsilon \\ &\times \int_{R_{\min}}^{R_{\max}} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) W_{vJ}(R_\omega) 4\pi R_\omega^2 dR_\omega. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Его удобно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} \alpha_{vJ}^{\text{de}}(T_e) &= \frac{g_{\text{de}}}{\hbar g_{T_e}} \int_0^{R_{\max}^{vJ}} \langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) \rangle_{T_e} \\ &\times \exp\left[-\frac{\Delta U_{fi}(R_\omega)}{k_B T_e}\right] W_{vJ}(R_\omega) 4\pi R_\omega^2 dR_\omega, \end{aligned} \quad (5.17)$$

где величина $\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) \rangle_{T_e}$ описывается формулой

$$\begin{aligned} \langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) \rangle_{T_e} &= \int_0^{\infty} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) e^{-\frac{\varepsilon'}{k_B T_e}} d\left(\frac{\varepsilon'}{k_B T_e}\right) = \\ &= \int_{\frac{\Delta U_{fi}(R_\omega)}{k_B T_e}}^{\infty} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) e^{\frac{\Delta U_{fi}(R_\omega) - \varepsilon}{k_B T_e}} d\left(\frac{\varepsilon}{k_B T_e}\right). \end{aligned} \quad (5.18)$$

5.3. Интегральный вклад колебательно-вращательных уровней в сечение диссоциативного возбуждения молекулярного иона

В плазмах смесей инертных газов, рассматриваемых в данной работе, содержатся молекулярные ионы с малыми энергиями диссоциации D_0 и малыми

колебательными квантами $\hbar\omega_e$. Отсюда следует, что даже при комнатных газовых температурах $k_{\text{B}}T \gtrsim 300$ К выполняется условие $k_{\text{B}}T \gtrsim \hbar\omega_e$. Это приводит к заселению большого числа колебательно-вращательных состояний, так что полное сечение диссоциативного возбуждения определяется вкладом всего квазиконтинуума состояний vJ . В данном разделе представлен вывод формулы для сечения $\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon)$, усредненного по распределению молекулярных ионов по колебательно-вращательным состояниям.

В простейшем случае больцмановского распределения сечение $\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon)$ определяется выражением

$$\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) = \frac{1}{\mathfrak{s}Z_{\text{vr}}} \sum_{vJ} (2J+1) \exp\left[-\frac{\mathcal{E}_{vJ}}{k_{\text{B}}T}\right] \sigma_{vJ}^{\text{de}}, \quad Z_{\text{vr}} = \frac{1}{\mathfrak{s}} \sum_{vJ} (2J+1) \exp\left[-\frac{\mathcal{E}_{vJ}}{k_{\text{B}}T}\right]. \quad (5.19)$$

Здесь $Z_{\text{vr}}(T)$ — статистическая сумма колебательно-вращательных состояний молекулярного иона, а \mathfrak{s} — фактор симметрии, равный 2 в случае гомоядерных ионов, если $U_i(R)$ является Σ -термом, и равный 1 в иных случаях. В рамках приближения квазиконтинуума колебательно-вращательных состояний имеем

$$\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) = \frac{1}{Z_{\text{vr}}(T) \mathfrak{s}} \int_0^{v_{\text{max}}} dv \int_0^{J_{\text{max}}(v)} 2JdJ \exp\left[-\frac{E_{vJ} + D_0}{k_{\text{B}}T}\right] \sigma_{vJ}^{\text{de}}(\varepsilon). \quad (5.20)$$

Здесь $E_{vJ} = \mathcal{E}_{vJ} - D_0$ обозначает колебательно-вращательную энергию относительно предела диссоциации, $E_{v=0, J=0} = -D_0$. Величина $J_{\text{max}}(E)$ является максимально возможным значением J для каждого фиксированного значения энергии в квазиконтинууме $E < 0$. $J_{\text{max}}(E)$ находится из условия $|U_i^J(R_e^J)| \geq |E|$ (R_e^J — равновесное межъядерное расстояние в потенциальной яме U_i^J). Это условие означает, что глубина потенциальной ямы основного электронного терма молекулярного иона с учетом центробежного члена должна при $0 \leq J < J_{\text{max}}$ превышать величину $|E|$.

Используя соотношение Бора-Зоммерфельда, мы выражаем dv как $dv = (T_{vJ}/2\pi\hbar) dE_{vJ}$, так что выражение (5.20) принимает вид

$$\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi\hbar\mathfrak{s}Z_{\text{vr}}(T)} \int_{-D_0}^0 dE \int_0^{J_{\text{max}}} \sigma_{v(E)J}^{\text{de}}(\varepsilon) \exp\left[-\frac{E + D_0}{k_{\text{B}}T}\right] T_{v(E)J} J dJ, \quad (5.21)$$

где $E \equiv E_{vJ} < 0$, а период $T_{v(E)J}$ колебательно-вращательного движения по

классически разрешенной области межъядерных расстояний R имеет вид описывается формулой (3.26).

Подставляя выражение (5.14) в (5.21), получим

$$\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) = \frac{8\pi^2 g_{\text{de}}}{\hbar k^2 \mathfrak{s} Z_{\text{vr}}} \int_{-D_0}^0 dE \int_0^{J_{\text{max}}} J dJ e^{-\frac{E+D_0}{k_{\text{B}}T}} T_{v(E)J} \times \int_{R_{\text{min}}^{\text{de}}(\varepsilon)}^{R_{\text{max}}^{\text{de}}(v(E)J)} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}} W_{v(E)J} R_{\omega}^2 dR_{\omega}. \quad (5.22)$$

Как и в разделе 3.3.2. Главы 3 при рассмотрении диссоциативной рекомбинации, для описания радиальной волновой функции $\chi_{vJ}(R)$ колебательно-вращательного движения ядер в классически разрешенной области применимо приближение JWKB [115], и в итоге получим выражение, аналогичное

$$\chi_{vJ}(R) = \frac{C_{vJ} \cos \Phi(R)}{R \sqrt{V_{vJ}(R)}}, \quad C_{vJ} = \frac{2}{\sqrt{T_{vJ}}},$$

$$\Phi(R) = \frac{1}{\hbar} \int_{a_1(vJ)}^R \mu V_{vJ}(R) dR - \frac{\pi}{4}, \quad (5.23)$$

в результате чего (5.8) принимает вид

$$W_{v(E)J}(R) = \frac{(\pi)^{-1} \cos^2 \Phi(R)}{T_{v(E)J} R^2 V_{v(E)J}(R)}, \quad (5.24)$$

где $a_{v(E)J}^i \leq R \leq b_{v(E)J}^i$. Как и в Главе 3, применим стандартное приближение $\langle \cos^2 \Phi(R) \rangle = 1/2$ для осциллирующей части функции $W_{v(E)J}(R)$, так что выражение для усредненного по распределению Больцмана сечения диссоциативного возбуждения примет вид:

$$\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) = \frac{2\pi g_{\text{de}}}{\hbar k^2 \mathfrak{s} Z_{\text{vr}}(T)} \int_{-D_0}^0 dE \int_0^{J_{\text{max}}} 2J dJ e^{-\frac{E+D_0}{k_{\text{B}}T}} \times \int_{R_{\text{min}}^{\text{de}}(\varepsilon)}^{R_{\text{max}}^{\text{de}}(v(E)J)} \frac{\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_{\omega}) dR_{\omega}}{V_{v(E)J}(R_{\omega})}. \quad (5.25)$$

Меняя порядок интегрирования, получим

$$\begin{aligned} \sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) &= \frac{2\pi g_{\text{de}}}{\hbar k^2 \mathfrak{z} Z_{\text{vr}}} \int_{-D_0}^0 e^{-\frac{E+D_0}{k_B T}} dE \int_{R_{\min}^{\text{de}}(\varepsilon)}^{R_{\max}^{\text{de}}(E)} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}} dR_\omega \\ &\times \int_0^{J_{\max}} \frac{2JdJ}{\sqrt{(2/\mu)[E - U_i(R) - \hbar^2 J^2 / (2\mu R^2)]}}, \end{aligned} \quad (5.26)$$

где максимальное значение $J_{\max}(E, R)$ вращательного квантового числа находится из выражения $\hbar^2 J_{\max}^2 / (2\mu R^2) = E - U_i(R)$, а $R_{\max}^{\text{de}}(E)$ определяется из условия $\Delta U_{fi}(R_{\max}^{\text{de}}(E)) = |E|$. Далее примем во внимание, что

$$\begin{aligned} \frac{(2\pi)^{-2}}{\hbar R^2} \int_0^{J_{\max}} \frac{2JdJ}{\sqrt{(2/\mu)[E - U_i(R) - \hbar^2 J^2 / 2\mu R^2]}} &= \\ = W_E(R) = \frac{\mu^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} \sqrt{E - U_i(R)}, \end{aligned} \quad (5.27)$$

где $E_{\min} \leq E < 0$, $a(E) \leq R \leq b(E)$ (здесь $a(E)$ и $b(E)$ — левая и правая классические точки поворота для потенциальной кривой $U_i(a, b) = E$). Тогда выражение для сечения диссоциативного возбуждения записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} \sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) &= \frac{8\pi^3 g_{\text{de}}}{k^2 \mathfrak{z} Z_{\text{vr}}} \int_{-D_0}^0 \exp\left(-\frac{E+D_0}{k_B T}\right) dE \\ &\times \int_{R_{\min}^{\text{de}}(\varepsilon)}^{R_{\max}^{\text{de}}(E)} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) R_\omega^2 W_E(R_\omega) dR_\omega. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Замена порядка интегрирования приводит к выражению

$$\begin{aligned} \sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) &= \frac{2\pi^2 g_{\text{de}}}{k^2 Z_{\text{vr}}} \exp\left(-\frac{D_0}{k_B T}\right) \int_{R_{\min}^{\text{de}}(\varepsilon)}^\infty \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) \\ &\times W_T^{\text{de}}(R_\omega) 4\pi R_\omega^2 dR_\omega. \end{aligned} \quad (5.29)$$

Здесь $W_T^{\text{de}}(R)$ — функция распределения координат, усредненная по распределению Больцмана с учетом вклада всех колебательно-вращательных дискретных уровней

$$W_T^{\text{de}}(R) = \frac{\mu^{3/2} / \sqrt{2}}{\mathfrak{z} \pi^2 \hbar^3} \int_{E_{\min}}^0 \sqrt{E - U_i(R)} e^{-\frac{E}{k_B T}} dE, \quad (5.30)$$

где $E_{\min} = -|\min\{U_i(R), 0\}|$. Интегрирование по E в формуле (5.30) дает нижнюю неполную гамма-функцию $\gamma(3/2, z) = \int_0^z t^{1/2} e^{-t} dt$, так что выражение для W_T^{de} принимает вид ($U_i(R) < 0$):

$$W_T^{\text{de}}(R) = \frac{1}{\mathfrak{s}} \left(\frac{\mu k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{U_i(R)}{k_B T}} \frac{\gamma\left(\frac{3}{2}, \frac{|U_i(R)|}{k_B T}\right)}{\Gamma(3/2)}. \quad (5.31)$$

Статистическая сумма $Z_{\text{vr}}(T)$ рассчитывается по квазиклассической формуле (3.50) [164] из Главы 3.

5.4. Квазиклассические выражения для констант скоростей диссоциации

Константа скорости диссоциативного возбуждения молекулярных ионов электронным ударом, учитывающая вклад всех колебательно-вращательных состояний, рассчитывается путем усреднения величины $v_\varepsilon \sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon)$ по функции распределения скоростей электронов при заданной электронной температуре T_e . При распределении Максвелла имеем

$$\alpha^{\text{de}}(T_e, T) = \langle v_\varepsilon \sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) \rangle_{T_e} = \frac{\sqrt{8/(\pi m_e)}}{(k_B T_e)^{3/2}} \int_0^\infty \varepsilon \sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T_e}\right) d\varepsilon. \quad (5.32)$$

Для удобства далее используем формулу (5.29) для сечений и сменим переменную интегрирования на $\hbar\omega$,

$$\begin{aligned} \alpha^{\text{de}}(T_e, T) &= 4\pi \frac{k_B T_e}{\hbar} \frac{\tilde{g}_{\text{de}}}{Z_{\text{vr}}} \exp\left(-\frac{D_0}{k_B T}\right) \left(\frac{\mu T}{m_e T_e}\right)^{3/2} \\ &\times \int_0^\infty e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T_e}} d\left(\frac{\varepsilon}{k_B T_e}\right) \int_0^{\min(\varepsilon, \Delta U_{fi}(R_0))} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) \\ &\times \exp\left(\frac{-U_i(R_\omega)}{k_B T}\right) \frac{\gamma\left(\frac{3}{2}, \frac{|U_i(R_\omega)|}{k_B T}\right)}{\Gamma(3/2)} \frac{R_\omega^2 \hbar d\omega}{\Delta F_{if}(R_\omega)}, \end{aligned} \quad (5.33)$$

где $\tilde{g}_{\text{de}} = g_{\text{de}}/\mathfrak{s}$. После этого сменим порядок интегрирования и воспользуемся формулой (5.18). Смена переменной интегрирования приводит к окончательному выражению для константы скорости диссоциативного возбуждения:

$$\begin{aligned}
\alpha^{\text{de}}(T_e, T) &= \left(\frac{\mu T}{m_e T_e} \right)^{3/2} \frac{k_B T_e}{\hbar} \frac{4\pi \tilde{g}_{\text{de}}}{Z_{\text{vr}}} \exp\left(-\frac{D_0}{k_B T}\right) \\
&\times \int_{R_0}^{\infty} \langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) \rangle_{T_e} \left[\gamma\left(\frac{3}{2}, \frac{|U_i(R_\omega)|}{k_B T}\right) / \Gamma(3/2) \right] \\
&\times \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_{fi}(R_\omega)}{k_B T_e}\right) R_\omega^2 dR_\omega.
\end{aligned} \tag{5.34}$$

5.5. Эффективный параметр взаимодействия

Как следует из представленных выше формул, эффективность диссоциативного возбуждения напрямую зависит от величины эффективного параметра взаимодействия, $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega)$, в точке перехода. В общем случае определение параметров взаимодействия оказывается сложной задачей, включающей многоэлектронные расчеты с использованием методов квантовой химии. Приведенные выше формулы могут быть использованы для подробного описания процессов диссоциативного возбуждения; однако, в рамках данной работы нас в первую очередь интересуют статистически усредненные сечения и константы скорости при рассматриваемых физических условиях. Для разумного описания указанных величин часто можно использовать упрощенные модели расчета параметров взаимодействия.

Известно, что в случае гомоядерных ионов использование дипольного приближения для потенциала взаимодействия [154, 186] дает результаты в хорошем согласии с более продвинутыми расчетами. Дипольное приближение для $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega)$ дает

$$\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_\omega) = \frac{4}{3\sqrt{3}} G(\varepsilon, \varepsilon - \hbar\omega) \frac{d_{fi}^2(R_\omega)}{(ea_0)^2}. \tag{5.35}$$

Здесь a_0 — борковский радиус, $G(\varepsilon, \varepsilon - \hbar\omega)$ — фактор Гаунта, равный единице при использовании приближения Крамерса; $d_{fi}(R_\omega)$ матричный элемент перехода для дипольного момента в точке $R = R_\omega$. Явное выражение для функции G можно найти в работах [16, 54].

В случае рассматриваемых в данной работе гетероядерных ионов инертных газов, ввиду сильного влияния спин-орбитального взаимодействия, ситуация несколько более сложная. На данный момент авторам неизвестны детальные исследования параметра связи в подобных системах. Однако, как было показано в Главе 3 при исследовании диссоциативной рекомбинации, простой полу-

аналитический подход, основанный на модели вакансий [14, 62], хорошо описывает основные свойства сечений и констант скоростей. В рамках данного подхода электронная оболочка иона сводится к эффективной одно-электронной вакансии ("дырке"), взаимодействующей со свободным электроном. Итоговое выражение для $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}$ имеет вид

$$\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}} = \frac{n^3 \Gamma_{\varepsilon \rightarrow n}}{2Ry}, \quad \Gamma_{\varepsilon \rightarrow n} = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon},$$

$$\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon} = 2\pi\nu_l / [(2l+1)n_*^3], \quad \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}} = \pi\nu_l / Ry, \quad (5.36)$$

где n_* — эффективное главное квантовое число атома $A(n)$, а $\nu_l = 2 \sum_{l'} \gamma_{ll'}/25$ и $\gamma_{ll'}$ — радиальный интеграл [14, 62], зависящий от волновых функций ридберговского электрона $A(n)$ и налетающего электрона (см. раздел 3.5. Главы 3). В первом приближении вакансионной модели (см. [14, 62]), зависимостью $\gamma_{ll'}$ от R можно пренебречь. Как видно из формулы (5.36), параметр связи $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}$ для свободно-свободных переходов выражается через ширину автоионизации, $\Gamma_{n \rightarrow \varepsilon}$, ридберговского уровня.

5.6. Анализ роли диссоциативного возбуждения и диссоциативной рекомбинации

Резонансная диссоциация ионов может происходить как в результате диссоциативного возбуждения, при котором электрон остается в непрерывном спектре после реакции, так и в результате диссоциативной рекомбинации, сопровождающейся захватом электрона в связанное состояние $A(n)$ (часто с $n \gg 1$). Оба процесса приводят к разрушению молекулярного иона, так что представляет интерес вывод выражения для полного коэффициента резонансной диссоциации с учетом данных процессов. Суммарная константа скорости диссоциативной рекомбинации на все уровни n рассчитывается путем суммирования: $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T) = \sum_n \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$ — с использованием выражения для $\alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$ из Главы 3. В рамках приближения квазинепрерывного спектра ридберговских уровней полный коэффициент описывается формулой

$$\begin{aligned}
\alpha^{\text{dr}}(T_e, T) &= \frac{\tilde{g}_{\text{dr}}}{Z_{\text{vr}}} \left(\frac{\mu k_{\text{B}} T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{D_0}{k_{\text{B}} T}} \left(\frac{2\pi \hbar^2}{m k_{\text{B}} T_e} \right)^{3/2} \\
&\times \frac{k_{\text{B}} T_e}{\hbar} \int_{R_0}^{\infty} \langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{dr}}(R_{\omega}) \rangle_{T_e} \exp \left[-\frac{U_i(R_{\omega})}{k_{\text{B}} T} \right] \\
&\times \exp \left[-\frac{\Delta U_{fi}(R_{\omega})}{k_{\text{B}} T_e} \right] \frac{\gamma \left(\frac{3}{2}, \frac{|U_i(R_{\omega})|}{k_{\text{B}} T} \right)}{\Gamma(3/2)} 4\pi R_{\omega}^2 dR_{\omega}, \tag{5.37}
\end{aligned}$$

Здесь $\tilde{g}_{\text{dr}} = g_{\text{BA}^{+(f)}} / (\mathfrak{s} g_{\text{BA}^{+(i)}})$, а $\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{dr}}(R_{\omega}) \rangle_{T_e}$ описывается формулой (5.18) с $x_{\text{max}} = \Delta U_{fi}(R_{\omega}) / k_{\text{B}} T_e$ и

$$x_{\text{min}} = \begin{cases} \frac{\Delta U_{fi}(R_{\omega})}{k_{\text{B}} T_e} - \frac{|\varepsilon_n|}{k_{\text{B}} T_e}, & \frac{\Delta U_{fi}(R_{\omega})}{k_{\text{B}} T_e} > |\varepsilon_n|, \\ 0, & \frac{\Delta U_{fi}(R_{\omega})}{k_{\text{B}} T_e} \leq |\varepsilon_n|. \end{cases} \tag{5.38}$$

Используем формулу (5.37) и положим, что минимально допустимый уровень n определяется условием $|\varepsilon_n| = \Delta U_{fi}(R_0)$. Используя формулы (5.37) и (5.34), получим выражение полного коэффициента, $\alpha^{\text{rd}}(T_e, T) = \alpha^{\text{dr}}(T_e, T) + \alpha^{\text{de}}(T_e, T)$, резонансной диссоциации с учетом обоих каналов диссоциативного возбуждения и диссоциативной рекомбинации,

$$\begin{aligned}
\alpha^{\text{rd}}(T_e, T) &= \frac{\tilde{g}_{\text{dr}}}{Z_{\text{vr}}} \left(\frac{\mu k_{\text{B}} T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{D_0}{k_{\text{B}} T}} \left(\frac{2\pi \hbar^2}{m k_{\text{B}} T_e} \right)^{3/2} \\
&\times \frac{k_{\text{B}} T_e}{\hbar} \int_{R_0}^{\infty} \langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{rd}}(R_{\omega}) \rangle_{T_e} \exp \left[-\frac{U_i(R_{\omega})}{k_{\text{B}} T} \right] \frac{\gamma \left(\frac{3}{2}, \frac{|U_i(R_{\omega})|}{k_{\text{B}} T} \right)}{\Gamma(3/2)} 4\pi R_{\omega}^2 dR_{\omega}. \tag{5.39}
\end{aligned}$$

Здесь $\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{rd}}(R_{\omega}) \rangle_{T_e}$ определяется формулой

$$\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{rd}}(R_{\omega}) \rangle_{T_e} = \int_0^{\infty} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{de}}(R_{\omega}) e^{-\frac{\varepsilon}{k_{\text{B}} T_e}} d \left(\frac{\varepsilon}{k_{\text{B}} T_e} \right). \tag{5.40}$$

Обратим внимание, что если $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_{\omega})$ зависит лишь от частоты перехода ω и в явном виде не зависит от энергии налетающего электрона, интегрирование по ε в (5.40) после вынесения этой величины за знак интеграла дает единицу, т.е. эта процедура не вносит никакой зависимости величины $\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}^{\text{rd}}(R_{\omega}) \rangle_{T_e}$ от электронной температуры T_e . В этом случае из формулы (5.39) следует зависимость $T_e^{-1/2}$ для полной константы скорости резонансной диссоциации $\alpha^{\text{rd}}(T_e, T)$.

Для ряда задач кинетики низкотемпературной плазмы представляет интерес определение конечных значений энергии электронов ε' в результате диссоциации молекулярных ионов BA^+ в процессах (3.1) и (5.1). С этой целью нами были рассчитаны дифференциальные константы скорости $d\alpha(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ [$\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{эВ}^{-1}$] двух рассматриваемых здесь процессов резонансной диссоциации в единичный интервал энергии электрона ε' в непрерывном ($\varepsilon' > 0$) или дискретном ($\varepsilon' \equiv \varepsilon_n < 0$) спектрах. Разработанный нами теоретический подход дает возможность рассматривать дифференциальные константы скорости процессов диссоциативной рекомбинации (3.1) и диссоциативного возбуждения (5.1) единым образом. Формальное отличие между данными процессами состоит лишь в знаке энергии ε' в конечных каналах реакций. Будем описывать суммарную константу скорости, $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T) = \sum_n \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$, диссоциативного захвата в рамках приближения квазинепрерывного спектра ридберговских уровней атома:

$$\alpha_{Ry}^{\text{dr}}(T_e, T) = \int \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T) dn = \int \alpha_{n(\varepsilon')}^{\text{dr}}(T_e, T) \frac{dn}{d\varepsilon'} d\varepsilon'. \quad (5.41)$$

С использованием данного описания, начальная формула для дифференциальной константы скорости $d\alpha^{\text{dr}}(\varepsilon', T_e, T)/d\varepsilon'$ процесса ДР на ридберговские уровни с энергией в интервале $(\varepsilon', \varepsilon' + d\varepsilon')$ приобретает вид

$$\frac{d\alpha^{\text{dr}}(T_e, T, \varepsilon')}{d\varepsilon'} = \alpha_{n(\varepsilon')}^{\text{dr}}(T_e, T) \frac{dn}{d\varepsilon'} = \alpha_{n(\varepsilon')}^{\text{dr}}(T_e, T) \frac{n^3}{2Ry}. \quad (5.42)$$

Используя формулу (5.42), можно записать следующее единое выражение для дифференциальной константы скорости, $d\alpha^{\text{rd}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$, резонансной диссоциации иона BA^+ при заданной энергии электрона ε' в конечном состоянии:

$$d\alpha^{\text{rd}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon' = \begin{cases} d\alpha^{\text{dr}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon', & \varepsilon' < 0, \\ d\alpha^{\text{de}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon', & \varepsilon' \geq 0. \end{cases} \quad (5.43)$$

Выражение для дифференциальной константы скорости, $d\alpha^{\text{de}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$, диссоциативного возбуждения может быть непосредственно получено из (5.33) после замены порядка интегрирования и использования соотношения $\varepsilon' = \varepsilon - \hbar\omega$. Аналогичное выражение для величины $d\alpha^{\text{dr}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ выводится с использованием формулы (5.42), а также формул (3.44) и (3.53) для константы скорости, $\alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$, диссоциативного захвата на ридберговский уровень n из Главы 3. Итоговое выражение для дифференциальной константы скорости, $d\alpha^{\text{rd}}/d\varepsilon'$,

резонансной диссоциации имеет следующий вид:

$$\frac{d\alpha^{\text{rd}}(T_e, T, \varepsilon')}{d\varepsilon'} = \frac{\tilde{g}_{\text{de}}}{\hbar Z_{\text{VT}}(T)} \left(\frac{\mu T}{m T_e} \right)^{3/2} \int_{R_0}^{R_{\text{max}}(\varepsilon')} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \times e^{-\frac{U_i(R_\omega) + D_0}{k_B T}} e^{-\frac{\Delta U_{fi}(R_\omega) + \varepsilon'}{k_B T_e}} \left[\gamma \left(\frac{3}{2}, \frac{|U_i(R_\omega)|}{k_B T} \right) / \Gamma(3/2) \right] 4\pi R_\omega^2 dR_\omega. \quad (5.44)$$

Здесь верхний предел интегрирования по R определяется из условия:

$$R_{\text{max}}(\varepsilon') = \begin{cases} R_{|\varepsilon'|} : \Delta U_{fi}(R_{|\varepsilon'|}) = |\varepsilon'|, & \varepsilon' < 0, \\ \infty, & \varepsilon' \geq 0. \end{cases} \quad (5.45)$$

Интегрирование выражения (5.44) по энергии электрона ε' приводит к представленному в данной Главе выражению (5.39) для суммарной константы скорости $\alpha^{\text{rd}}(T_e, T)$ процессов диссоциативного возбуждения и диссоциативной рекомбинации. Представленный подход позволяет установить, в каких состояниях (свободных или связанных) оказывается преобладающее число электронов в результате резонансных столкновений с молекулярными ионами VA^+ , что представляет интерес, в частности, для решения ряда задач спектроскопической диагностики и при исследовании кинетики релаксационных процессов в рекомбинирующей плазме.

5.7. Результаты и обсуждение

5.7.1. Сечения и константы скорости диссоциативного возбуждения гетероядерных ионов инертных газов

В данном разделе представлены результаты расчетов сечений и коэффициентов резонансной диссоциации электронным ударом гетероядерных ионов инертных газов. На рис. 5.2 приведены графики сечений $\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T)$ [см²] диссоциации ионов ArXe^+ (рис. а) и NeXe^+ (рис. б) при газовых температурах $T = 300$ (кривые 1), 500 (кривые 2) и 900 К (кривые 3). Данные ионы существенно различаются по величинам энергии диссоциации ($D_0(\text{ArXe}^+) = 171$ meV, $D_0(\text{NeXe}^+) = 33$ meV), поэтому при рассматриваемых газовых температурах у них наблюдается кардинально разный характер зависимости $\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T)$ от энергии ε налетающего электрона. В случае систем с относительно высокими D_0 (как ArXe^+ или, например, KrXe^+) при низких температурах T большинство ионов локализовано вблизи положения равновесия R_e нижнего терма $U_i(R)$. По

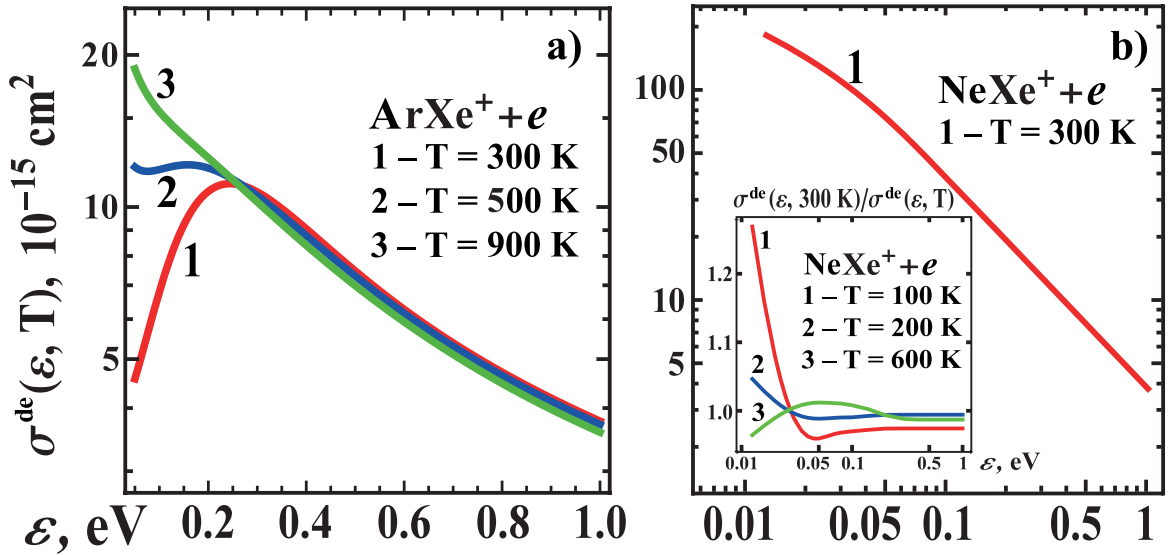


Рис. 5.2: Сечения $\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T)$ диссоциативного возбуждения ионов ArXe^+ (рис. а) и NeXe^+ (рис. б) электронным ударом при газовых температурах $T = 300 \text{ K}$ (кривые 1), 500 K (кривые 2) и 900 K (кривые 3). Вставка на рис. б: относительные сечения $\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T)/\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, 300 \text{ K})$ диссоциативного возбуждения ионов NeXe^+ $T = 100 \text{ K}$ (кривые 1), 200 K (кривые 2) и 600 K (кривые 3).

этой причине для указанных систем наблюдается явно выраженный пороговый характер зависимости $\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T)$ от ε . Положение максимума можно оценить из условия, что точка R_ε резонансного перехода $\varepsilon \rightarrow 0$ совпадает с положением равновесия R_e иона RgXe^+ , или, иначе, $\Delta U_{fi}(R_e) = \varepsilon$. Отсюда следует, что положение максимума смещается в сторону более высоких ε по мере роста D_0 . При увеличении газовой температуры молекулярные ионы перестают быть локализованными вблизи положения равновесия, и поэтому пороговый характер зависимости $\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T)$ от ε начинает ослабевать. В случае иона с умеренной энергией диссоциации порог не наблюдается уже при $T = 900 \text{ K}$. В области высоких значений ε сечение диссоциации не зависит от газовой температуры T . Это связано с тем фактом, что при высоких энергиях налетающих электронов неадиабатические переходы с высокой вероятностью происходят во всей области межъядерных расстояний, так что эффективность диссоциации не зависит от характера распределения колебательных состояний. В силу указанных выше факторов, в случае слабосвязанных ионов (NeXe^+) сечение диссоциации $\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T)$ не имеет максимума по ε и не зависит от T .

На рис. 5.3а приведены константы скорости диссоциативного возбуждения (ДВ), $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$, ионов $\text{ArXe}^+ + e$. Из рисунка видно, что в случае умеренно-связанных ионов данная величина сильно зависит от T . При низких газовых температурах наблюдается пороговый характер протекания диссоциативного

возбуждения, но с ростом T он начинает ослабевать, в полном соответствии с результатами на рис. 5.2а. Коэффициент диссоциации электронным ударом быстро растет с ростом T в области низких электронных температур T_e и почти не зависит от T в области высоких $T_e (\gtrsim 10000)$ К, что также вытекает из результатов на рис. 5.2а. На рисунке 5.3а также приведены данные по интегральному вкладу диссоциативной рекомбинации (ДР) на ридберговские уровни, $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$. Расчеты величины $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ [cm^3/s] производились путем суммирования констант скорости диссоциативного захвата на ридберговские уровни: $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T) = \sum_{n \geq 8} \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$; величины $\alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$ рассчитывались с использованием теоретического подхода из Главы 3. Из рисунка 5.3 следует, что эффективность диссоциативного захвата на ридберговские состояния довольно медленно растет с ростом газовой температуры T , что обусловлено тем фактом, что возрастает вероятность неадиабатических переходов вдали от положения равновесия R_e , сопровождающихся заселением высоких уровней n . Сравнение констант скоростей процессов ДВ и ДР показывает, что в случае умеренно связанных молекулярных ионов при низких газовых T и электронных T_e температурах преобладает диссоциативный захват на ридберговские уровни. При таких условиях ролью процесса ДВ можно пренебречь. При высоких температурах $T_e \gtrsim 5000$ К, напротив, распад молекулярного иона происходит преимущественно через канал (5.1). Отметим, что по мере роста T ситуация может значительно поменяться: величина $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ становится сопоставимой с $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ даже при $T_e = 2000$ К. Максимальные значения $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ достигают $10^{-7} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, так что процесс ДВ становится эффективным и должен учитываться в кинетических моделях плазмы.

В случае слабосвязанных катионов (NeXe^+) диссоциативное возбуждение (5.1) становится сопоставимым с диссоциативной рекомбинацией (3.1) даже при температурах ниже 300 К. Из рисунка 5.3b видно, что для NeXe^+ при $T = 100$ К константы скорости, $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ и $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$, становятся сопоставимыми при $T_e = 310$ К. Причина высокой эффективности ДВ в этом случае состоит в том, что у данного процесса гораздо меньше характерная передача энергии по сравнению с процессом ДР. Согласно проведенным расчетам, канал ДР начинает вносить существенный вклад в динамику разрушения ионов лишь при крайне низких газовых $T \sim 100 \text{ K}$ и электронных $T_e \lesssim 300$ К температурах. Таким образом, в случае катионов с низкими D_0 канал диссоциативного возбуждения электронным ударом оказывается гораздо более эффективным, и его эффек-

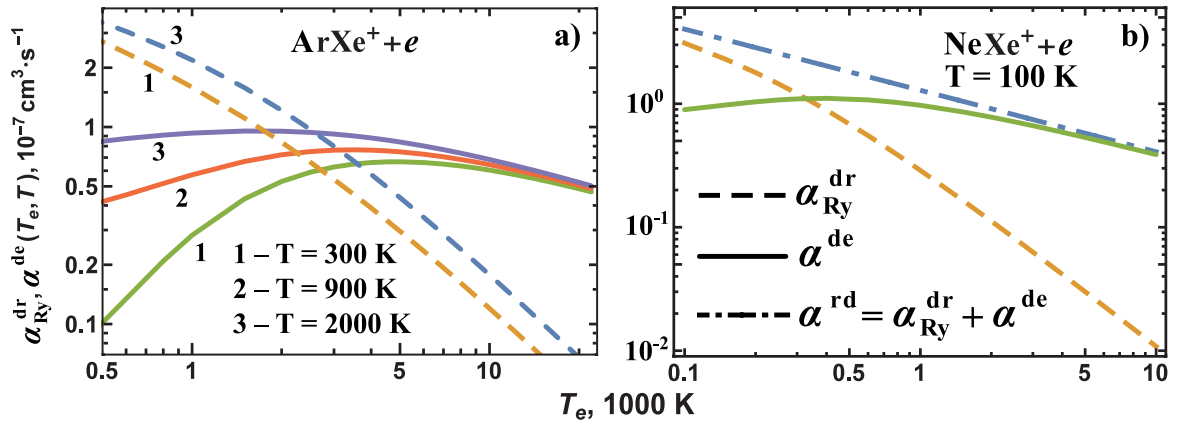


Рис. 5.3: Сплошные кривые — константы скорости диссоциативного возбуждения электронным ударом $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ ионов ArXe^+ (рис. а) при газовых температурах $T = 300 \text{ K}$ (кривые 1), 900 K (кривые 2) и 2000 K (кривые 3) и ионов NeXe^+ (рис. б) при $T = 100 \text{ K}$. Пунктирные кривые — интегральный вклад диссоциативного захвата на ридберговские уровни $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$. Штрих-пунктирные кривые — полные константы скорости диссоциации $\alpha^{\text{rd}}(T_e, T) = \alpha^{\text{de}}(T_e, T) + \alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ молекулярных ионов.

тивность тем выше, чем ниже энергия диссоциации катионов VA^+ . При этом, ввиду того, что молекулярные ионы не локализованы вблизи положения равновесия R_e , указанный процесс не имеет порогового характера и почти не зависит от газовой температуры T (см. рис. 5.2b).

На рис. 5.3b также представлены результаты расчетов суммарного коэффициента $\alpha(T_e, T) = \alpha^{\text{de}}(T_e, T) + \alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ разрушения ионов с учетом каналов диссоциативной рекомбинации на ридберговские уровни и диссоциации электронным ударом. Данный коэффициент имеет простую степенную зависимость $T_e^{-1/2}$. Зависимость $T_e^{-1/2 \pm \delta}$ является традиционной и многократно наблюдалась в экспериментах при измерении диссоциативной рекомбинации молекулярных ионов инертных газов при сравнительно низкой температуре ($\lesssim 1000 \text{ K}$). Из представленных в диссертации результатов, а также из результатов других работ [77, 114] следует, что при дальнейшем увеличении T_e происходит более быстрый спад коэффициента рекомбинации. Процесс диссоциативного возбуждения компенсирует этот быстрый спад при высоких температурах, что и приводит к зависимости $\alpha^{\text{rd}} \sim T_e^{-1/2}$ для полной константы скорости диссоциации в широком диапазоне температур электронов.

5.7.2. Диссоциация гомоядерных ионов инертных газов

В данном разделе приведены результаты расчетов сечений и коэффициентов резонансной диссоциации электронным ударом гомоядерных ионов инертных газов Xe_2^+ и Ar_2^+ . Указанные ионы, в отличие от рассмотренных выше гетеро-

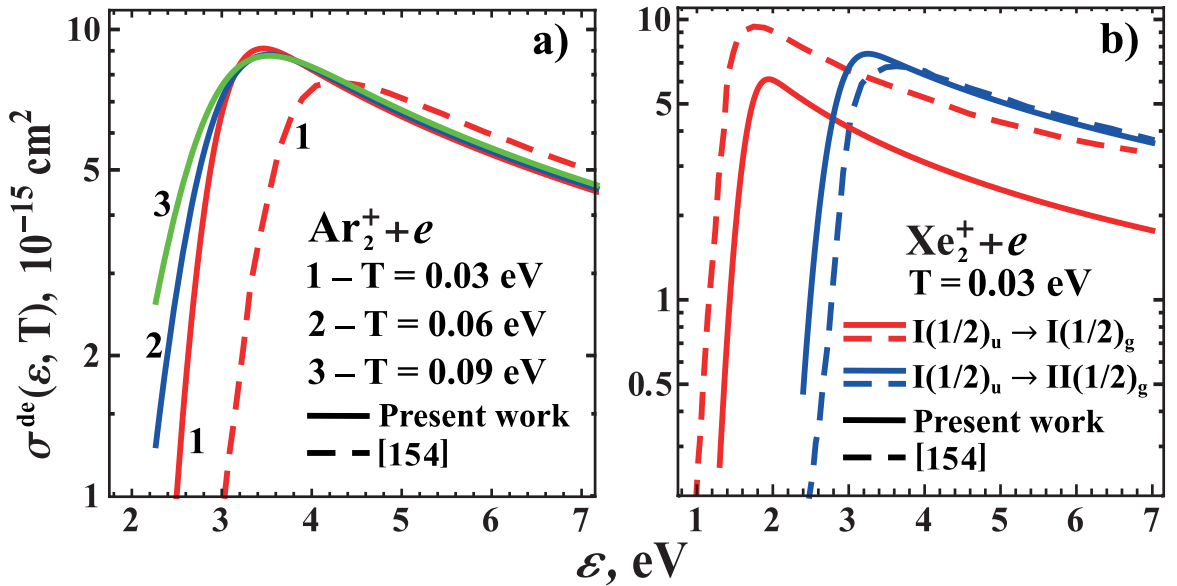


Рис. 5.4: Сечения $\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T)$ диссоциативного возбуждения молекулярных ионов Ar_2^+ (рис. а) и Xe_2^+ (рис. б) электронным ударом при различных газовых температурах T в результате неадиабатических переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ (рис. б) и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ (рис. а, б). Сплошные линии — расчеты, выполненные в рамках диссертационного исследования; пунктирные линии — результаты расчетов [154].

ядерных ионов RgXe^+ , имеют весьма высокие значения энергии диссоциации D_0 ($D_0(\text{Ar}_2^+) = 1.19 \text{ eV}$, $D_0(\text{Xe}_2^+) = 0.97 \text{ eV}$), поэтому процессы их диссоциации электронным ударом имеют ряд отличительных особенностей, описанных ниже.

На рис. 5.4 изображены графики сечений резонансной диссоциации ионов Ar_2^+ (а) и Xe_2^+ (б) при газовых температурах $T = 0.03, 0.06$ и 0.09 eV . Поскольку рассматриваемые системы являются гомоядерными, имеется два рабочих неадиабатических перехода из основного состояния $I(1/2)_u$ молекулярного иона A_2^+ , сопровождающихся диссоциацией электронным ударом: $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$. На рис. 5.4а даны графики только для переходов $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$, а на рис. 5.4б — для обоих переходов. Дело в том, что в случае иона Ar_2^+ переходом $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ можно пренебречь, так как квадрат его дипольного момента вблизи положения равновесия R_e на 2 порядка меньше, чем у перехода $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$. В случае же иона Xe_2^+ эффективность обоих переходов вблизи R_e сопоставима, так что они оба должны быть учтены при расчетах.

Из рис. 5.4 видно, что для обоих столкновительных систем $\text{Ar}_2^+ + e$ и $\text{Xe}_2^+ + e$ и для обоих типов переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ отчетливо наблюдается пороговый характер диссоциации электронным ударом. Как и в случае умеренно связанных систем, положения максимумов сечений по ε можно

оценить из условия, что переходы $\varepsilon \rightarrow 0$ происходят вблизи положения равновесия иона R_e . Таким образом, ввиду высоких значений энергий диссоциации ионов Ar_2^+ и Xe_2^+ , процессы диссоциации электронным ударом имеют очень высокий порог энергии $\varepsilon \gtrsim 2 \text{ eV}$ и потому крайне неэффективны при низких электронных температурах. При этом, в отличие от умеренно связанных систем, в данном случае пороговый характер процессов диссоциации наблюдается во всем диапазоне газовых температур $T \leq 2000 \text{ K}$. Исходя из этого, можно ожидать, что для всех рассматриваемых в диссертации температур T диссоциативное возбуждение гомоядерных ионов инертных газов будет вносить крайне малый вклад в динамику распада ионов при низких $T_e \lesssim 5000 \text{ K}$.

На рис. 5.4, помимо результатов расчетов сечений $\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T)$ по представленному в диссертации подходу, также приведены результаты расчетов из работы [154]. Из рисунка следует хорошее качественное и количественное совпадение сравниваемых результатов, хотя и наблюдаются некоторые различия. Так, в случае иона Ar_2^+ асимптотические значения сечений совпадают, но положения максимумов $\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T)$ по ε несколько различаются. В случае же иона Xe_2^+ сечения, соответствующие переходам $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$, почти совпадают, а сечения, соответствующие переходам $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$, имеют схожее поведение, но различаются количественно в ~ 1.5 раза. Основные причины в различии результатов заключаются в применении нами более полного подхода к расчету статистических сумм колебательно-вращательных состояний ионов Rg_2^+ , а также в использовании нами более современных данных по термам ионов и дипольным моментам переходов.

Результаты расчетов коэффициентов $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ резонансной диссоциации ионов Ar_2^+ и Xe_2^+ приведены на рис. 5.5. Исследования проводились при газовых температурах $T \sim 300 \div 2000 \text{ K}$ и электронных температурах $T_e \sim 1000 \div 70000 \text{ K}$. На рис. 5.5, в полном соответствии с результатами расчетов сечений из рис. 5.4, наблюдается пороговый характер резонансной диссоциации обоих ионов, Ar_2^+ и Xe_2^+ , причем пороговость сохраняется даже при $T = 2000 \text{ K}$. Максимальная эффективность механизма резонансной диссоциации наблюдается при весьма высоких значениях T_e : $T_e \approx 50000 \text{ K}$ для Ar_2^+ и $T_e \approx 30000 \text{ K}$ для Xe_2^+ . В случае Ar_2^+ положение максимума по T_e сдвинуто в сторону более высоких температур ввиду более высокого значения энергии диссоциации катиона. Из рис. 5.5 видно, что в области низких $T_e \lesssim 10000 \text{ K}$ эффективность резонансной дис-

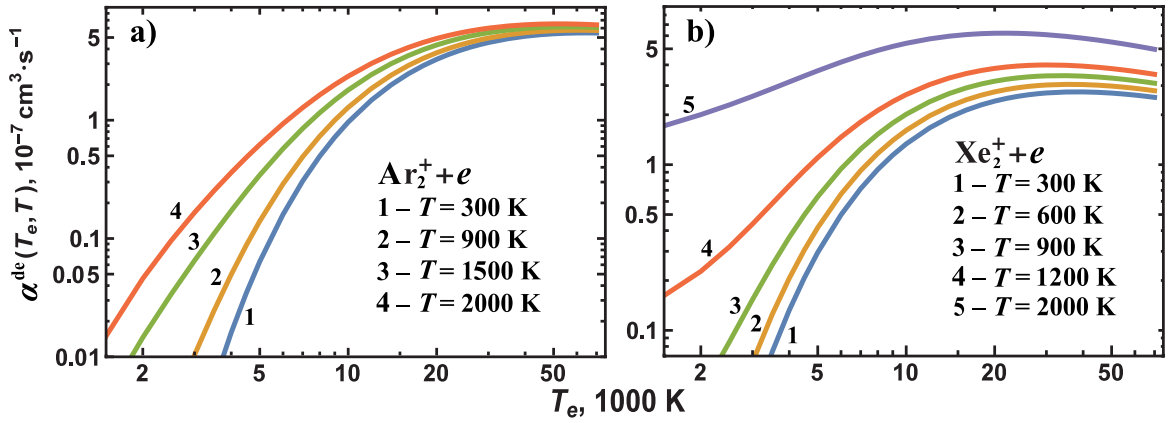


Рис. 5.5: Константы скорости диссоциативного возбуждения гомоядерных ионов Ar_2^+ (рис. а) и Xe_2^+ (рис. б) электронным ударом $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ при различных газовых температурах.

социации обоих гомоядерных ионов быстро возрастает с увеличением газовой температуры T : при повышении T с 300 К до 2000 К наблюдается рост $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ вплоть до 2 порядков. Причина столь быстрого роста состоит в том, что при низких электронных температурах резонансные переходы происходят вдали от положения равновесия $R \gtrsim R_e$, а с ростом T возрастает вероятность иону быть локализованным в данных областях по R . Описанный эффект в наибольшей степени проявляется для сильносвязанных ионов (как Ar_2^+ и Xe_2^+) и почти не наблюдается для слабосвязанных систем (как NeXe^+ и HeXe^+). При высоких электронных температурах $T_e \gtrsim 20000$ К возрастает вероятность неадиабатических переходов по всей доступной области R , и поэтому эффективность диссоциации электронным ударом почти не зависит от T .

В рамках задачи об исследовании роли процесса резонансной диссоциации ионов электронным ударом в разрушении ионов Rg_2^+ представляет интерес сравнительный анализ данного механизма и близкого к нему механизма диссоциативной рекомбинации. Подобное сравнение было нами проведено для столкновительной системы $\text{Xe}_2^+ + e$, причем коэффициент диссоциации $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ сравнивался как с коэффициентом $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ диссоциативного захвата только на ридберговские уровни $n \geq 8$, так и с коэффициентом $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T)$ полного диссоциативного захвата на все возможные состояния. Соответствующие результаты сравнений приведены на рис. 5.6а и 5.6б, соответственно. Из рис. 5.6а видно, что канал диссоциативной рекомбинации на ридберговские уровни, подобно каналу диссоциации электронным ударом, имеет явный пороговый характер. Положение максимума для данного канала смещено в сторону более низких $T_e \approx 10000$ К по сравнению с каналом резонансной диссоциации, поскольку при диссоциативном захвате для переходов вблизи положения равновесия иона R_e требу-

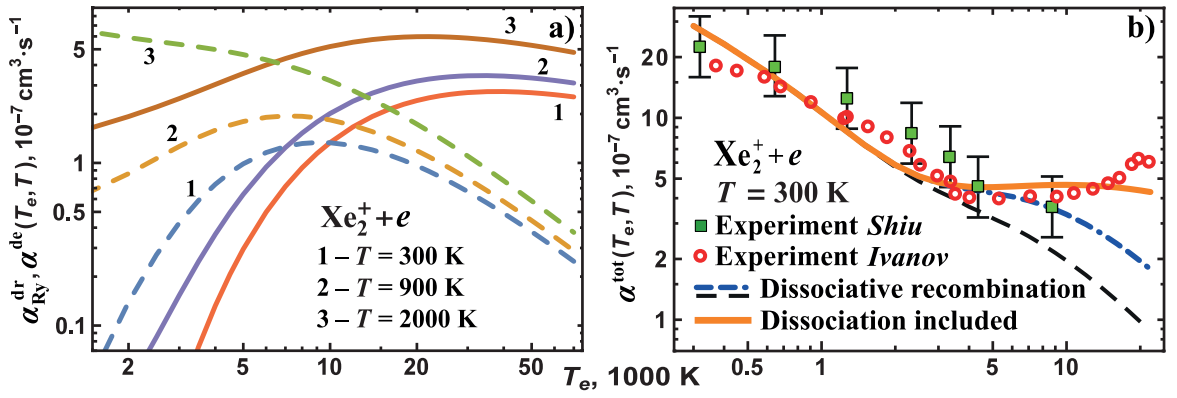


Рис. 5.6: а) Константы скорости диссоциативной рекомбинации на ридберговские уровни $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ (пунктирные кривые) и диссоциативного возбуждения молекулярных ионов Xe_2^+ электронным ударом $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ (сплошные кривые) при различных T . б) Константы скорости разрушения ионов Xe_2^+ электронным ударом $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ при $T = 300$ К. Пунктирная кривая, диссоциативная рекомбинация на низкие уровни ксенона; штрих-пунктирная кривая, диссоциативная рекомбинация на низкие и ридберговские уровни; сплошная кривая, диссоциативная рекомбинация и диссоциативное возбуждение; круги — эксперимент Иванова [152]; квадраты — эксперимент Shiu *et al* [187].

ются гораздо меньшие значения энергии электрона ($\varepsilon^{\text{d.r.}} = \Delta U_{fi}(R_e) - \text{Ry}/n^2$, $\varepsilon^{\text{de}} = \Delta U_{fi}(R_e) + \varepsilon'$). По той же причине, что и для величины $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$, коэффициент $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ быстро растет с ростом газовой температуры T . Сравнимые механизмы имеют приблизительно равный вклад в динамику разрушения ионов при $T_e = 10000$ К.

На рис. 5.6b продемонстрировано сравнение коэффициента диссоциативной рекомбинации с учетом всех уровней $\tilde{\alpha}^{\text{dr}}(T_e, T) = \tilde{\alpha}_{\text{low}}^{\text{dr}}(T_e, T) + \alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ с полным коэффициентом разрушения иона Xe_2^+ $\tilde{\alpha}^{\text{total}}(T_e, T) = \tilde{\alpha}^{\text{dr}}(T_e, T) + \alpha^{\text{de}}(T_e, T)$, учитывающим как диссоциативную рекомбинацию, так и диссоциацию иона электронным ударом, при $T = 300$ К. Отдельно представлен график для величины $\tilde{\alpha}_{\text{low}}^{\text{dr}}(T_e, T)$, которая характеризует захват на низколежащие уровни ксенона. Она была описана на оценочном уровне, как захват на эффективный низколежащий уровень, для которого эффективное главное квантовое число и автоионизационная ширина были получены с помощью интерполяции методом наименьших квадратов экспериментальных данных из работ [152, 187] в области низких температур $T_e \leq 1000$ К. Неадиабатические переходы, сопровождающиеся диссоциативным захватом на нижние состояния, происходят вблизи положения равновесия молекулярного иона Xe_2^+ и потому не имеют порогового характера и многократно доминируют в области низких электронных (и газовых) температур $T_e \lesssim 3000$ К. Сравнение кривых $\tilde{\alpha}_{\text{low}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ и $\tilde{\alpha}^{\text{dr}}(T_e, T)$ показывает, что канал резонансного захвата на ридберговские уровни начинает вносить

существенный вклад в разрушение ионов Xe_2^+ при температуре $T_e \gtrsim 3000$ К и доминирует при $T_e \approx 10000$ К. В свою очередь, сравнение кривых $\tilde{\alpha}^{\text{dr}}(T_e, T)$ и $\tilde{\alpha}^{\text{total}}(T_e, T)$ указывает на то, что механизм диссоциации электронным ударом начинает проявляться при $T_e \gtrsim 10000$ К и становится преобладающим при $T_e \approx 15000$ К.

Проведенные в диссертации расчеты демонстрируют хорошее качественное и количественное совпадение с представленными на рис. 5.6b экспериментальными результатами из работ [152, 187] во всей исследуемой области температур. Это указывает на правомерность представленной в диссертации модели, согласно которой резонансное разрушение молекулярных гомоядерных ионов описывается тремя различными каналами столкновений с электронами: диссоциативным захватом на нижние уровни ксенона, диссоциативным захватом на ридберговские состояния и диссоциацией иона Xe_2^+ электронным ударом. Используемый нами теоретический подход позволяет с высокой степенью точности определить области электронных температур, в которых начинает проявляться или доминирует тот или иной канал разрушения.

5.7.3. Изменение энергии электронов в процессе диссоциации молекулярных ионов

В рамках исследования свойств резонансного механизма диссоциации ионов BA^+ электронным ударом представляет интерес рассмотрение задачи о влиянии данного процесса на кинетику охлаждения плазмы. С этой целью нами был осуществлен анализ того, на какие характерные значения $\hbar\omega$ меняется энергия электронов в результате переходов $\varepsilon \rightarrow \varepsilon' - \hbar\omega$ при диссоциации: $\text{BA}^+ + e \rightarrow \text{B} + \text{A}^+ + e$. На рис. 5.7 представлены графики величины $d\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T, \hbar\omega)/d\hbar\omega$ [$\text{cm}^2 \cdot \text{eV}^{-1}$], где $d\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T, \hbar\omega)$ есть дифференциальное сечение диссоциации ионов BA^+ электронным ударом, сопровождающимся передачей энергии в интервале $\hbar(\omega, \omega + d\omega)$:

$$\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T) = \int d\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T, \hbar\omega) = \int (d\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T, \hbar\omega)/d\hbar\omega) d\hbar\omega.$$

Расчеты были проведены при начальной энергии электронов $\varepsilon = 1.5$ eV для системы $\text{ArXe}^+ + e$ при различных T (рис. 5.7a), а также для систем KrXe^+ ($D_0 = 400$ мэВ), ArXe^+ и NeXe^+ при $T = 300$ К (рис. 5.7b).

Из рис. 5.7 видно, что в случае умеренносвязанных ионов (ArXe^+ и KrXe^+) при низких температурах ($T = 300$ К) у величины $d\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T, \hbar\omega)/d\hbar\omega$ имеется

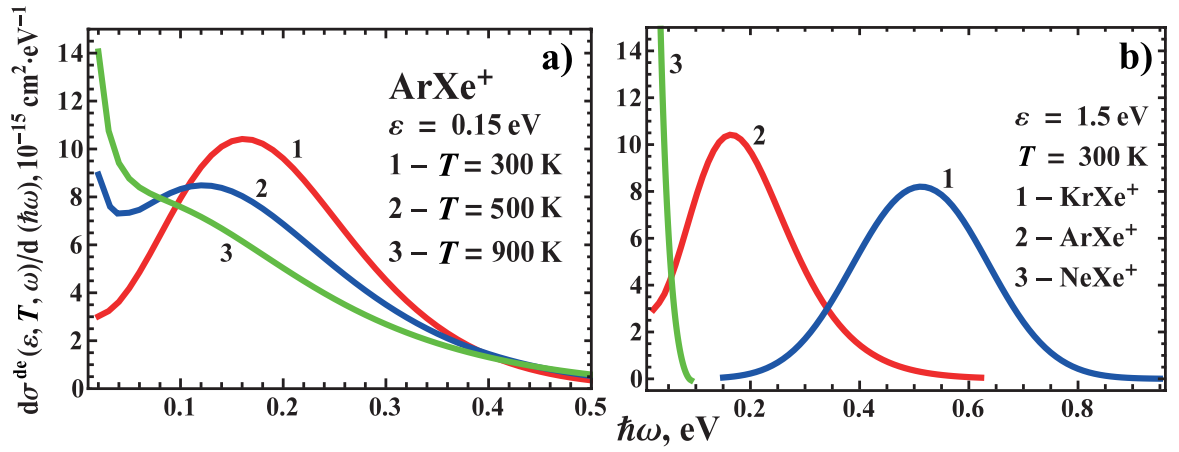


Рис. 5.7: Дифференциальное сечение $d\sigma^{\text{diss}}(\varepsilon, T, \hbar\omega)/d\hbar\omega$ [$\text{cm}^2 \cdot \text{eV}^{-1}$] диссоциативного возбуждения гетероядерных ионов инертных газов электронами с начальной энергией $\varepsilon = 1.5$ эВ в интервале передачи энергии $\hbar(\omega, \omega + d\omega)$. Рис. а: диссоциация ионов ArXe^+ при газовых температурах $T = 300$ (кривая 1), 500 (кривая 2) и 900 К (кривая 3). Рис. б: диссоциация ионов KrXe^+ (кривая 1), ArXe^+ (кривая 2) и NeXe^+ (кривая 3) при $T = 300$ К.

максимум по $\hbar\omega$, что указывает на явный пороговый характер их диссоциации, в полном соответствии с представленными ранее результатами. Положение максимума приблизительно равно $\Delta U_{fi}(R_e)$, что указывает на тот факт, что умеренносвязанные ионы при малых T локализованы преимущественно вблизи положения равновесия. В случае же слабосвязанных ионов (NeXe^+) данное условие не выполняется, так что имеет место традиционно наблюдаемая для столкновительных переходов зависимость, согласно которой наиболее эффективными оказываются переходы с как можно меньшей передачей энергии. Математически данная зависимость выражается в том, что величина $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}$ оказывается тем выше, чем меньше $\varepsilon - \varepsilon'$. Эта зависимость продемонстрирована также на рис. 5.7а для системы $\text{ArXe}^+ + e$ при $T = 900$ К, что означает, что при данной температуре ионы ArXe^+ перестают быть локализованными вблизи R_e . При $T = 500$ К для ArXe^+ имеет место интересный промежуточный случай, когда наблюдается как максимум в зависимости $d\sigma^{\text{de}}(\varepsilon, T, \hbar\omega)/d\hbar\omega$ от $\hbar\omega$, так и рост данной величины по мере уменьшения энергии передачи. Это значит, что, хотя многие катионы и локализованы вблизи положения равновесия, существенная часть также имеет большие межъядерные расстояния $R \gtrsim R_e$, и в указанной области проявляется традиционный для столкновительных процессов характер диссоциации.

Из анализа результатов, представленных на рис. 5.2 и 5.7, следует, что в случае диссоциации умеренносвязанных ионов (ArXe^+ и KrXe^+) электронным

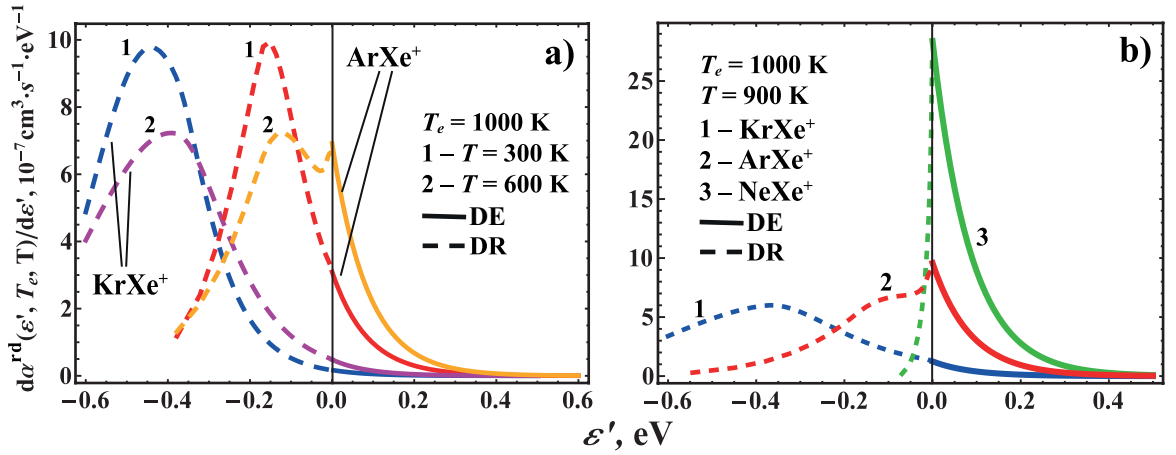


Рис. 5.8: Дифференциальный коэффициент $d\alpha^{\text{rd}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ [$\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{eV}^{-1}$] разрушения гетероядерных ионов инертных газов в результате диссоциативного возбуждения ($\varepsilon' \geq 0$) и диссоциативной рекомбинации ($\varepsilon' < 0$) в зависимости от конечной энергии электронов ε' . Рис. а: диссоциация ионов KrXe^+ и ArXe^+ при газовых температурах $T = 300$ (кривая 1) и 600 (кривая 2) и электронной температуре $T_e = 1000$ К. Рис. б: то же для ионов KrXe^+ (кривая 1), ArXe^+ (кривая 2) и NeXe^+ (кривая 3) при $T = 900$ К и $T_e = 1000$ К.

ударом при низких температурах T происходят преимущественно переходы $\varepsilon \approx \Delta U_{fi}(R_e) \rightarrow \varepsilon' \approx 0$. При повышении газовой температуры, однако, возрастает вероятность переходов на больших межъядерных расстояниях, и характерные величины передачи энергии $\hbar\omega$ падают (см. рис. 5.7а). Наконец, при очень высоких газовых температурах $k_B T \gtrsim D_0$ или в случае слабосвязанных ионов преобладают каналы диссоциации, при которых начальные и конечные энергии электронов крайне малы ($\varepsilon, \varepsilon' \lesssim 0.02$ eV).

В рамках задачи об охлаждении электронов, а также более широкой задачи о рекомбинационных процессах в плазме смесей инертных газов представляет интерес не только установление характерных величин энергии передачи $\hbar\omega$, но и определение конечных значений энергии электронов ε' в результате диссоциации молекулярных ионов VA^+ в процессах ДР и ДВ. С этой целью в данной работе были проведены расчеты дифференциального коэффициента $d\alpha^{\text{rd}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ разрушения ионов VA^+ по формуле (5.44). Соответствующие результаты представлены на рис. 5.8. Расчеты осуществлены для катионов KrXe^+ , ArXe^+ (рис. 5.8а и 5.8б) и NeXe^+ (рис. 5.8б) при электронной температуре $T_e = 1000$ К и газовых температурах $T = 300$ К, 600 К и 900 К. Как видно из рисунка 5.8а, в случае умеренно связанных ионов при низких газовых температурах ($T = 300$ К) доминирует механизм диссоциативной рекомбинации, сопровождающийся заселением ограниченной области связанных состояний с низкими энергиями ε' . Эффективность же механизма диссоциации ионов элект-

тронным ударом в этом случае оказывается экспоненциально малой. При увеличении же газовой температуры рабочая область конечных энергий смещается в сторону более высоких ε' . В случае иона ArXe^+ (с меньшей энергией диссоциации) появляется локальный максимум величины $d\alpha^{\text{rd}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ в области ε' , что свидетельствует о возрастании роли диссоциации электронным ударом и диссоциативного захвата на высоковозбужденные состояния ксенона $n \gg 1$. Описанные наблюдения демонстрируют конкуренцию двух ключевых факторов, определяющих характер резонансных процессов столкновения VA^+ и e , а именно: локализация ионов вблизи положения равновесия R_e и стремление передавать как можно меньшую энергию при столкновениях. При низких T большинство умеренносвязанных ионов локализованы вблизи R_e , и потому преобладают переходы с передачей энергии $\Delta U_{fi}(R_e)$, то есть, преимущественно, переходы $\varepsilon = 0 \rightarrow \varepsilon' = -\Delta U_{fi}(R_e)$. При повышении T локализация уже не столь сильна, и начинают проявляться переходы $\varepsilon \rightarrow \varepsilon'$ в области малых энергий, происходящие на больших межъядерных расстояниях. Как видно из рис. 5.8b, при $T = 900$ К интегральный вклад (площадь под кривой) таких переходов для ArXe^+ становится сопоставимым с вкладом переходов $\varepsilon = 0 \rightarrow \varepsilon' = -\Delta U_{fi}(R_e)$, а на графике $d\alpha^{\text{rd}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ наблюдается единственный явный максимум в $\varepsilon' = 0$.

Интересный промежуточный случай наблюдается на рис. 5.8a для ArXe^+ при $T = 600$ К. На графике имеются два максимума по ε' , что указывает на одновременное проявление двух конкурирующих факторов. Максимум при $\varepsilon' \approx -0.18$ eV обусловлен локализацией ионов, в то время как максимум в нуле описывает переходы (диссоциацию и диссоциативную рекомбинацию) с минимальной передачей энергии. Левый максимум имеет гораздо более широкий профиль, и его ширина определяется преимущественно свойствами термов молекулярного иона VA^+ . Ширина правого максимума (~ 0.1 eV), в свою очередь, зависит как от свойств термов, так и от электронной температуры ($T_e \approx 0.1$ eV). Можно сказать, что узкий правый пик является визуализацией так называемого “горлышка стока” (или, иначе, “узкого горлышка”) — области энергий, в которой охлаждение и релаксация плазмы протекают крайне медленно, так как сопровождаются целым каскадом двусторонних процессов с малой передачей энергии (в данном случае — процессов диссоциации и диссоциативной рекомбинации, а также обратных процессов). Таким образом, график для ArXe^+ при $T = 600$ К, с одной стороны, отражает сложный характер охлаждения и ре-

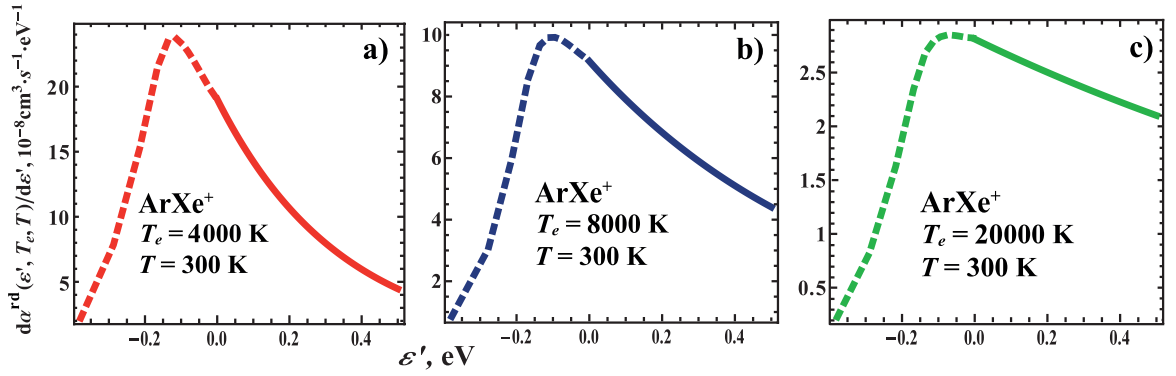


Рис. 5.9: Дифференциальный коэффициент $d\alpha^{\text{rd}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ [$\text{cm}^3 \cdot \text{c}^{-1} \cdot \text{eV}^{-1}$] разрушения ионов ArXe^+ электронным ударом при газовой температуре $T = 300$ К и электронных температурах $T_e = 4000$ К (а), 8000 К (б) и 20000 К (с).

лаксации плазмы при резонансных столкновениях $\text{VA}^+ + e$, с другой стороны, показывает для кинетики указанных процессов важную особенность переходов $\varepsilon = 0 \rightarrow \varepsilon' = -\Delta U_{fi}(R_e)$: они позволяют избегать области “горлышка стока”, сразу заселяя состояния с низкими ε' .

Из рис. 5.8б для $T = 900$ К видно, что в случае слабосвязанных ионов (NeXe^+) имеется один ярко выраженный максимум $\varepsilon' = 0$. При этом значение в максимуме оказывается гораздо выше, чем в максимумах для ArXe^+ и KrXe^+ , хотя суммарные коэффициенты разрушения ионов $\alpha^{\text{rd}}(T_e, T)$ (площадь под кривыми) оказываются для всех случаев примерно одинаковыми. Этот факт указывает на исключительное доминирование низкоэнергетических переходов $\varepsilon \rightarrow \varepsilon'$ в слабосвязанных системах. Согласно расчетам, подобная картина наблюдается для ионов NeXe^+ во всей рассматриваемой области параметров плазмы.

Наконец, покажем, каким образом меняется характер переходов $\varepsilon \rightarrow \varepsilon'$ при увеличении газовой температуры T_e . На рис. 5.9 приведены графики дифференциального коэффициента $d\alpha^{\text{rd}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ для ArXe^+ при $T = 300$ К и $T_e = 4000$ К (рис. 5.9а), 8000 К (рис. 5.9б) и 20000 К (рис. 5.9с). Из рисунка следует, что при увеличении электронной температуры максимум $d\alpha^{\text{rd}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ смещается в сторону более высоких ε' . Поскольку при низких T существенная доля ионов локализована вблизи R_e , определяющий вклад вносят переходы с передачей энергии $\Delta U_{fi}(R_e)$. Однако, ввиду того, что характерные значения начальной энергии электронов оказываются смещены в сторону высоких $k_B T_e$, то и конечные значения ε' также оказываются смещены в сторону высоких энергий. Это приводит к повышению относительной роли процессов диссоциации ионов VA^+ , сопровождающихся переходами в свободные состояния электронов. Исходя из представленных выше соображений, указанный механизм начинает

вносить доминирующий интегральный вклад в разрушение ионов при условии $k_B T_e \gtrsim \Delta U_{fi}(R_e)$, что продемонстрировано на рис. 5.9b и 5.9c.

5.8. Основные выводы

В этой Главе представлена теоретическая модель диссоциативного возбуждения (ДВ) ионов VA^+ электронным ударом. С использованием данной модели были изучены процессы диссоциативного возбуждения гетероядерных и гомоядерных ионов инертных газов в условиях возбуждения большого набора колебательно–вращательных состояний. Подобные условия могут быть реализованы в опытах с совмещенными пучками, а также часто наблюдаются в плазмах послесвечения разряда. Выбор таких условий позволил реализовать новый теоретический подход, в рамках которого используется приближение квазиконтинуума колебательно–вращательных состояний, а также применяется квантовое описание неадиабатических переходов между термами квазиклассических ионов $VA^+ + e$, образуемых в процессе столкновения. На основе данного подхода были получены квантово–механические формулы сечений и констант скоростей диссоциативного возбуждения ионов VA^+ электронным ударом. Также, с помощью формул из Главы 3 по диссоциативной рекомбинации (ДР), приведено квазиклассическое выражение для полного коэффициента резонансного разрушения молекулярных ионов за счет родственных механизмов ДВ и ДР.

Были приведены результаты расчетов констант скорости ДВ для гетероядерных ионов $ArXe^+$ и $NeXe^+$ в зависимости от T_e при газовых температурах, меняющихся от 100 до 2000 К. На примере этих ионов показано, что в случае умеренно- и сильносвязанных систем процесс ДВ имеет явно выраженный пороговый характер с максимумом величины $\alpha^{de}(T_e, T)$ по T_e . Показано, что данный эффект связан с тем фактом, что большинство умеренносвязанных ионов локализовано вблизи положения равновесия R_e . Соответственно, при повышении газовой температуры пороговый характер процесса ДВ ослабевает, и его эффективность при низких T_e растет. Также показано, что в случае слабо–связанных ионов механизм ДВ не является пороговым и убывает с ростом T_e .

С целью сравнительного анализа эффективности каналов ДР и ДВ были осуществлены расчеты соответствующих констант скоростей для гетероядерных ($ArXe^+$, $NeXe^+$) и гомоядерных (Ar_2^+ , Xe_2^+) ионов. Показано, что в случае слабо–связанных ионов процесс ДВ является доминирующим во всем рассмат-

риваемом диапазоне температур. В случае же умеренно- и сильносвязанных ионов эффективность механизма ДВ, ввиду его порогового характера, оказывается крайне малой в области низких $T_e \lesssim 1000$ К, но доминирует при высоких T_e ($T_e \gtrsim 5000$ К для ArXe^+ и $T_e \gtrsim 20000$ К для Ar_2^+ и Xe_2^+).

Для рассматриваемых нами ионов был осуществлен расчет полной константы скорости $\alpha(T_e, T)$ резонансного разрушения молекулярных ионов за счет ДВ и ДР на ридберговские уровни. В случае гетероядерных ионов величина $\alpha(T_e, T)$ имеет часто наблюдаемую в опытах зависимость $T_e^{-1/2}$.

Продемонстрировано, что в случае сильносвязанных гомоядерных систем выделяются три различных канала разрушения молекулярных ионов: ДР с заселением низких состояний, ДР с заселением ридберговских уровней и ДВ. В области низких электронных температур доминирует канал ДР с захватом низких состояний, потому что соответствующие резонансные переходы происходят вблизи положения равновесия R_e ионов Rg_2^+ . При повышении $T_e \gtrsim 5000$ К начинает проявляться канал захвата на ридберговские уровни, а при дальнейшем росте $T_e \gtrsim 10000$ К включается процесс ДВ, который становится доминирующим при $T \gtrsim 40000$ К. Важно отметить, что в рамках представленного подхода все резонансные процессы диссоциации рассматриваются единым образом и самосогласованно. Это дает возможность, имея экспериментальные или теоретические кривые хотя бы по одному из этих процессов, качественно оценивать свойства и эффективность каждого отдельного резонансного канала.

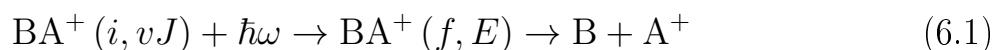
Наконец, в рамках данной Главы, путем расчета дифференциальных сечений и констант скоростей ДВ и ДР на единицу конечной энергии, было проведено исследование процессов охлаждения электронов за счет рассматриваемых резонансных процессов в плазме смесей Кг/Хе, Аг/Хе и Ne/Хе. Установлено, что в случае слабо-связанных ионов резонансные столкновительные процессы имеют квазиупругий характер, а начальные и конечные энергии электронов близки к нулю. Доминирующим столкновительным процессом является диссоциативное возбуждение. Иным образом обстоит ситуация при участии сильно- и умеренносвязанных ионов при низких $T \lesssim 1000$ К и $T_e \lesssim 2000$ К: в этом случае преобладают процессы ДР с передачей энергии $\hbar\omega \approx \Delta U_{fi}(R_e)$ (R_e — положение равновесия ионов VA^+), сопровождающиеся заселением низколежащих ридберговских уровней n с энергией связи $|\varepsilon_n| \approx \Delta U_{fi}(R_e)$. Однако, при повышении электронной температуры T_e до $T_e \gtrsim 10000$ К начинают преобладать переходы с передачей энергии $\hbar\omega \approx \Delta U_{fi}(R_e)$, происходящие в результате

ДВ. При повышении же газовой температуры с $T \sim 300$ К до $T \sim 2000$ К существенно возрастает роль квазиупругих процессов ДВ в области околонулевых энергий электронов ε . Указанные результаты представляют интерес при исследовании охлаждения электронов в рамках целого ряда задач, связанных с самосогласованным описанием кинетики релаксации плазмы.

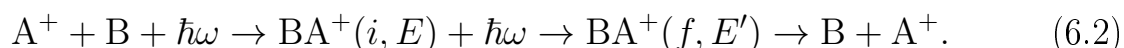
Глава 6. Фотодиссоциация гомоядерных ионов инертных газов и свободно-свободные радиационные переходы

6.1. Исходные формулы для эффективных сечений и коэффициентов фотопоглощения

В данной главе рассмотрены резонансные процессы фотодиссоциации



молекулярных ионов инертных газов (см. рис. 6.1). Кроме того, был также рассмотрен ранее почти не изученный механизм неадиабатических радиационных свободно-свободных переходов



Главное отличие процесса фотодиссоциации (6.1) от процесса (6.2) состоит в том, что в первом случае молекулярный ион BA^+ находится в связанном состоянии, а во втором — в состоянии непрерывного спектра по ядерному движению. Основные задачи, рассмотренные в данной главе, связаны с исследованием зависимости сечений и констант скоростей процессов (6.1) и (6.2) от газовой температуры T , а также с качественным сравнительным анализом данных механизмов. Теоретический подход, используемый для расчетов, аналогичен подходу, представленному в Главе 5 для расчета сечений диссоциации ионов электронным ударом.

В этой главе приведены результаты конкретных расчетов сечений фотодиссоциации (6.1) гомоядерных ионов Kr_2^+ и констант скорости свободно-свободных переходов (6.2) для столкновительной системы $\text{Kr} + \text{Kr}^+$. Для данных (квази-)молекулярных ионов учитывались два типа резонансных неадиабатических

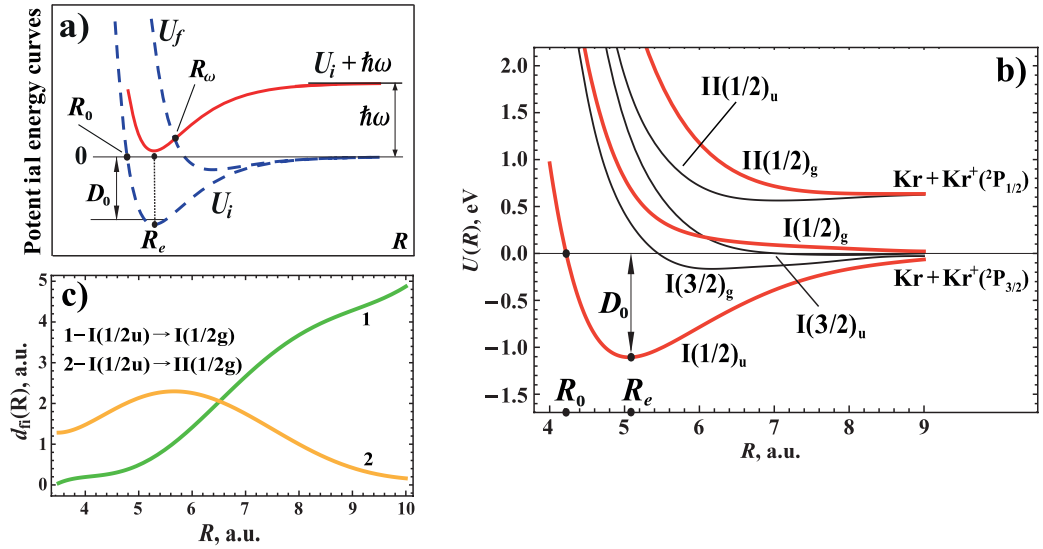


Рис. 6.1: (а) Схема фотодиссоциации молекулярных ионов и свободно-свободных радиационных переходов. (б) Структура электронных термов системы Kr_2^+ . (в) Дипольные матричные элементы переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ (кривая 1) и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ (кривая 2) в случае иона Kr_2^+ .

переходов между термами: $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ (схема электронных термов системы Kr_2^+ приведены на рисунке 6.1). Расчеты проводились в широком диапазоне газовых температур $T \sim 300 - 15000$ К. В таком диапазоне выполняется условие сильного возбуждения колебательно-вращательных состояний гомоядерных ионов инертных газов: $k_B T \gtrsim \hbar\omega_e$, что позволяет применять приближение квази-непрерывного спектра ($\hbar\omega_e = 23$ мэВ). Отметим, однако, что, согласно нашим тестовым расчетам, область практической применимости представленного в работе теоретического подхода на основе приближения квази-непрерывности спектра, несмотря на наличие формального условия $k_B T \gtrsim \hbar\omega_e$, оказывается значительно более широкой и включает в себя большой диапазон температур, типичных для задач спектроскопии и кинетики лабораторной низкотемпературной плазмы.

Основные формулы для парциальных сечений фотодиссоциации $\sigma_{vJ}^{\text{pd}}(\omega)$ молекулярных ионов с фиксированных колебательно-вращательных vJ -уровней и для интегрального вклада всех колебательно-вращательных состояний в полное сечение фотодиссоциации и результирующий коэффициент фотодиссоциационного поглощения света приведены в работе [23]. Там же представлены квантовые и квазиклассические выражения для эффективных сечений и соответствующих коэффициентов поглощения света для случая неадиабатических свободно-свободных переходов при столкновениях атомов и атомарных ионов. Исходное выражение для сечения фотодиссоциации $\sigma_{vJ}^{\text{pd}}(\omega)$ [см^2] молекулярного

иона A_2^+ в начальном колебательно-вращательном состоянии vJ имеет следующий вид [23]:

$$\sigma_{vJ}^{\text{pd}}(\omega) = \frac{4\pi^2\omega}{3c(2J+1)} \left[(J+1) \left| d_{E',J+1;vJ}^{(fi)} \right|^2 + J \left| d_{E',J-1;vJ}^{(fi)} \right|^2 \right]. \quad (6.3)$$

Выражение для эффективного сечения $\sigma_{E',E}^{(fi)}(\omega)$ [$\text{см}^4 \cdot \text{с}^{-1}$] резонансных радиационных свободно-свободных переходов описывается формулой:

$$\sigma_{E',E}^{(fi)}(\omega) = \frac{1}{\kappa} \frac{g_{A_2^+}}{g_{A_2}g_{A^+}} \frac{8\pi^4\hbar\omega}{3cq^2} \sum_J \left[(J+1) \left| d_{E',J+1;EJ}^{(f,i)} \right|^2 + J \left| d_{E',J-1;EJ}^{(f,i)} \right|^2 \right]. \quad (6.4)$$

Здесь $E = \hbar^2 q^2 / 2\mu$ и $E' = E + \hbar\omega$ — начальное и конечное значения энергии относительного движения ядер.

С использованием формулы (6.3) и квазиклассического приближения для расчета матричных элементов перехода в [23] была выведена формула для усредненного по осцилляциям сечения фотодиссоциации с заданного колебательно-вращательного vJ -уровня. Эта формула имеет следующий вид:

$$\sigma_{vJ}^{\text{pd}}(\omega) = \frac{8\pi^2\omega}{3cT_{vJ}} \frac{|d_{fi}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{fi}(R_\omega) V_{vJ}(R_\omega)}. \quad (6.5)$$

Здесь используются стандартные обозначения

$$V_{vJ}(R_\omega) = \sqrt{(2/\mu) \left(E_{vJ} - U_i(R_\omega) - \hbar^2(J+1/2)^2 / (2\mu R_\omega^2) \right)}, \quad T_{vJ} = \frac{2\pi\hbar}{|E_{vJ} - E_{v\pm 1,J}|}.$$

Полное сечение $\sigma_T^{\text{pd}}(\omega)$ [см^2] фотодиссоциации при заданной газовой температуре T с учетом вклада всех колебательно-вращательных состояний vJ получается в результате усреднения по распределению Больцмана:

$$\sigma_T^{\text{pd}}(\omega) = \sum_{vJ} \sigma_{vJ}^{\text{pd}}(\omega) \frac{N_{A_2^+}^{(vJ)}}{N_{A_2^+}} = \frac{1}{\mathfrak{s}Z_{\text{vr}}(T)} \sum_{vJ} (2J+1) \sigma_{vJ}^{\text{pd}}(\omega) e^{-\epsilon_{vJ}/kT}. \quad (6.6)$$

Здесь $N_{A_2^+} = \sum_{vJ} N_{A_2^+}^{(vJ)}$ — полная концентрация молекулярных ионов A_2^+ в связанном состоянии $I(1/2)_u$, а $Z_{\text{vr}}(T)$ — статистическая сумма всех колебательно-вращательных состояний vJ , рассчитываемая по квазиклассической формуле (3.50).

Для получения (полу-)аналитического выражения формулы (6.6) в работе [23] использовался теоретический подход, состоящий в применении приближения квази-непрерывного спектра колебательно-вращательных состояний. Данное приближение применимо при условии $k_B T \gtrsim \hbar\omega_e$, которое для молекулярного иона Kr_2^+ выполняется уже при температурах, близких к комнатным

($\hbar\omega_e = 23$ мэВ). Итоговое квантово-механическое выражение для сечения фотодиссоциации $\sigma_T^{\text{pd}}(\omega)$ принимает вид:

$$\sigma_T^{\text{pd}}(\omega) = \frac{16\pi^3 \omega R_\omega^2 |d_{fi}(R_\omega)|^2}{3c \Delta F_{fi}(R_\omega) Z_{\text{vr}}} \left(\frac{\mu kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{D_0 + U_i(R_\omega)}{kT}\right) \Theta_T^{\text{pd}}(R_\omega), \quad (6.7)$$

где функция $\Theta_T^{\text{pd}}(R_\omega) = \Theta_T^{\text{dr}}(R_\omega)$ (см. формулу (3.33)) описывает вклад дискретного спектра молекулярных ионов в фотопоглощение в результате неадиабатических переходов. При использовании квазиклассического приближения она описывается формулой

$$\Theta_T^{\text{pd}}(R_\omega) = \frac{\gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/k_B T)}{\Gamma(3/2)}. \quad (6.8)$$

Коэффициент фотодиссоциации $k_T^{\text{pd}}(\omega)$ [см^{-1}] связан с сечением $\sigma_T^{\text{pd}}(\omega)$ фотодиссоциации при заданной газовой температуре соотношением

$$k_T^{\text{pd}}(\omega) = \sigma_T^{\text{pd}}(\omega) N_{A_2^+}. \quad (6.9)$$

В условиях локального термодинамического равновесия полная концентрация $N_{A_2^+} = \sum_{vJ} N_{A_2^+}^{(vJ)}$ молекулярных ионов $A_2^+(I(1/2)_u)$ подчиняется закону действующих масс:

$$N_{A_2^+} = \frac{g_{A_2^+}}{s g_A g_{A^+}} Z_{\text{vr}}(T) \left(\frac{2\pi\hbar^2}{\mu k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{D_0}{k_B T}\right) N_A N_{A^+}. \quad (6.10)$$

С помощью данного соотношения формула для коэффициента фотодиссоциации может быть выражена через произведение концентраций атомов и атомарных ионов [23]:

$$k_T^{\text{pd}}(\omega) = \eta_T^{\text{pd}}(\omega) N_A N_{A^+}, \quad \eta_T^{\text{pd}}(\omega) = \sigma_T^{\text{pd}}(\omega) \frac{[N_{A_2^+}]}{[N_A][N_{A^+}]}$$

$$\eta_T^{\text{pd}}(\omega) = \frac{1}{\varkappa} \frac{g_{A_2^+}}{g_A g_{A^+}} \frac{16\pi^3 \omega R_\omega^2 |d_{fi}(R_\omega)|^2}{3c \Delta F_{fi}(R_\omega)} \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{kT}\right) \Theta_T^{\text{pd}}(R_\omega). \quad (6.11)$$

Коэффициент поглощения $k_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$ [см^{-1}] за счет свободно-свободных переходов (6.2) пропорционален произведению концентраций, $N_A N_{A^+}$ [см^{-6}], атомарных ионов A^+ и атомов A :

$$k_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = \eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) N_A N_{A^+}, \quad \eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = \left\langle V \sigma_{E',E}^{(fi)}(\omega) \right\rangle_T. \quad (6.12)$$

Здесь $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$ [см^5] — это константа скорости свободно-свободных радиационных переходов, получаемая в результате усреднения величины $\left\langle V \sigma_{E',E}^{(fi)}(\omega) \right\rangle_T$

по функции распределения скоростей V относительного движения тяжелых частиц. При использовании функции распределения Максвелла, соответствующей газовой температуре T , получается следующая формула для $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$ [23] :

$$\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) = \frac{1}{\varkappa} \frac{g_{A_2^+}}{g_A g_{A^+}} \frac{16\pi^3 \omega R_\omega^2 |df_i(R_\omega)|^2}{3c \Delta F_{fi}(R_\omega)} \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{kT}\right) \Theta_T^{\text{fr-fr}}(R_\omega). \quad (6.13)$$

Здесь функция $\Theta_T^{\text{fr-fr}}(R_\omega)$ характеризует интегральный вклад состояний непрерывного спектра квазимолекулярного иона A_2^+ в коэффициент фотопоглощения, обусловленный неадиабатическими свободно-свободными радиационными переходами. В квазиклассическом приближении этот вклад может быть выражен через верхнюю неполную гамма-функцию:

$$\Theta_T^{\text{fr-fr}}(R_\omega) = \frac{\Gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/k_B T)}{\Gamma(3/2)}. \quad (6.14)$$

Полный коэффициент поглощения $k_T(\omega)$ [см^{-1}] в результате резонансных неадиабатических фотопроцессов (6.1) и (6.2) определяется формулой

$$k_T(\omega) = \sigma_T^{\text{pd}}(\omega) N_{A_2^+} + \eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) N_A N_{A^+},$$

которая при условии равновесия по ядерному движению может быть переписана с помощью соотношения (6.11) в следующем виде:

$$k_T(\omega) = \eta_T(\omega) N_A N_{A^+}, \quad \eta_T = \eta_T^{\text{fr-fr}} + \eta_T^{\text{pd}}. \quad (6.15)$$

Из формул (6.8) и (6.14) видно, что в квазиклассическом приближении $\Theta_T^{\text{fr-fr}}(R_\omega) + \Theta_T^{\text{pd}}(R_\omega) = 1$, так что окончательное выражение для полной константы скорости фотопоглощения η_T принимает простой вид:

$$\eta_T(\omega) = \frac{1}{\varkappa} \frac{g_{A_2^+}}{g_A g_{A^+}} \frac{16\pi^3 \omega R_\omega^2 |df_i(R_\omega)|^2}{3c \Delta F_{fi}(R_\omega)} \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{kT}\right). \quad (6.16)$$

Полный коэффициент фотопоглощения $K_T(\omega)$ за счет процессов (6.1) и (6.2) с учетом вынужденного излучения в условиях термодинамического равновесия определяется следующей формулой:

$$K_T(\omega) = k_T(\omega) \left[1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}\right]. \quad (6.17)$$

С помощью выражений (6.15) и (6.16) она может быть записана в окончательном виде

$$K_T(\omega) = \frac{1}{\varkappa} \frac{g_{A_2^+}}{g_A g_{A^+}} \frac{16\pi^3 \omega R_\omega^2 |df_i(R_\omega)|^2}{3c \Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \left[\exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{U_f(R_\omega)}{kT}\right) \right] N_A N_{A^+}. \quad (6.18)$$

Как видно из формул (6.7) и (6.13), сечения и константы скорости резонансных радиационных процессов существенно зависят от формы термов $U_i(R_\omega)$, $U_f(R_\omega)$ и матричных элементов дипольных моментов переходов $d_{fi}(R_\omega)$. Тестовые расчеты показали, что профиль сечений фотодиссоциации $\sigma_T^{\text{pd}}(\omega)$ сильно зависит от такого параметра, как положение равновесия нижнего терма R_e : при изменении величины R_e на 1.5% положение максимума по ω и значение в максимуме изменялись более, чем на 10%. Поэтому при расчетах, результаты которых приведены в данной главе, были использованы современные данные по термам молекулярного иона Kr_2^+ из работы [24] (смотри рис. 6.1b). Кроме того, отметим, что ввиду специфики термов Kr_2^+ , связанной с сильным влиянием спин-орбитального взаимодействия, необходимо учитывать не один, а два типа неадиабатических переходов: $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ (смотри рис. 6.1b,c).

6.2. Зависимости суммарных сечений фотодиссоциации от частоты фотона при различных температурах

На рисунке 6.2 приведены $\sigma^{\text{pd}}(\omega, T)$ [см²] молекулярных ионов Kr_2^+ в результате неадиабатических переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ (см. рис. 6.1b,c) при различных газовых температурах T . Из представленных результатов следует, что для обоих типов неадиабатических переходов при низких температурах T сечения имеют колоколообразный профиль с явно выраженным максимумом. Положение максимума определяется в первую очередь параметрами рассматриваемых термов и может быть оценено из условия, согласно которому неадиабатические переходы происходят вблизи положения равновесия R_e молекулярных ионов A_2^+ , то есть $\hbar\omega \approx \Delta U_{fi}(R_e)$. За счет этого сечения фотодиссоциации при переходах $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ смещены в коротковолновую область по сравнению со случаем $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$. При этом для данного типа молекулярных ионов максимум сечений при переходах $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ существенно, на 1–2 порядка, превосходит аналогичный максимум при переходах $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$. Данное различие обусловлено тем, что у перехода $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ гораздо более высокие значения матричного элемента дипольного момента $d_{fi}(R)$ вблизи положения равновесия R_e .

Как следует из рисунка 6.2, при повышении газовой температуры T профиль сечений фотодиссоциации расширяется. Данное изменение обусловлено

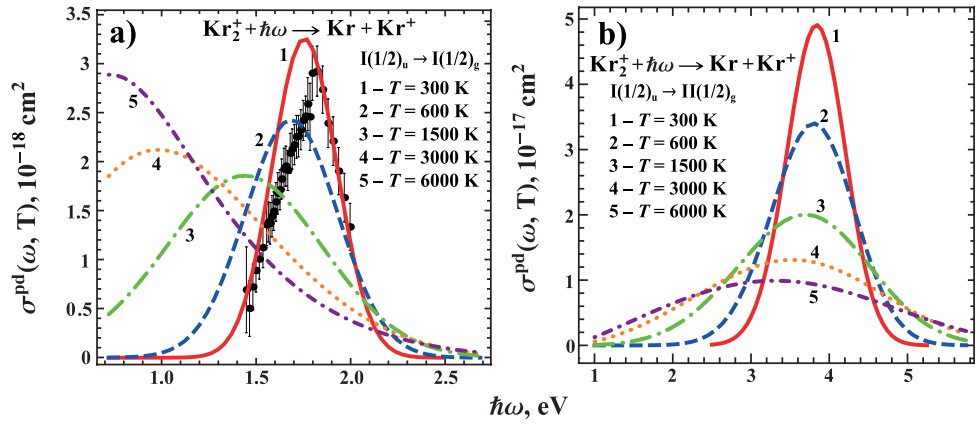


Рис. 6.2: Сечения фотодиссоциации $\sigma^{\text{pd}}(\omega, T)$ молекулярных ионов Kr_2^+ в результате неадиабатических переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ при газовых температурах $T=300$ К (кривые 1), 600 К (кривые 2), 1500 К (кривые 3), 3000 К (кривые 4) и 6000 К (кривые 5). Круги – экспериментальные данные [188].

тем, что по мере роста T ионы перестают быть локализованными вблизи положения равновесия R_e , так что возрастает вероятность неадиабатических переходов, сопровождающихся передачей энергии $\Delta U_{fi}(R) \lesssim \Delta U_{fi}(R_e)$ (при $R \gtrsim R_e$) и $\Delta U_{fi}(R) \gtrsim \Delta U_{fi}(R_e)$ (при $R \lesssim R_e$). При этом в случае переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ максимум сечений фотодиссоциации существенно смещается в длинноволновую область с ростом T . Такое смещение связано с тем, что эффективность таких резонансных неадиабатических переходов тем выше, чем ниже энергия передачи (математически это утверждение выражается тем, что матричный элемент дипольного момента растет по мере роста R). При повышении газовой температуры вероятность процессов с малой передачей энергии возрастает, так как возрастает вероятность расположения ионов на больших межъядерных расстояниях $R \gtrsim R_e$. Более того, как видно из рисунков, при $T \gtrsim 3000$ К для переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ перестают наблюдаться эффекты, связанные с преимущественной локализацией ионов на равновесных межъядерных расстояниях — у сечений фотодиссоциации отсутствует колоколообразный профиль и явно выраженный максимум. В этом случае величина сечений фотодиссоциации возрастает по мере уменьшения частоты внешнего излучения.

Приведенные в работе результаты расчетов сечений фотодиссоциации были сопоставлены с полученными ранее экспериментальными данными из [188] по сечениям фотодиссоциации при резонансных неадиабатических переходах $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ и при $T = 300$ К. На рисунке 6.2 продемонстрировано хорошее количественное и качественное соответствие сопоставленных результатов. Некоторое различие в положении максимума, вероятно, связано с недостаточ-

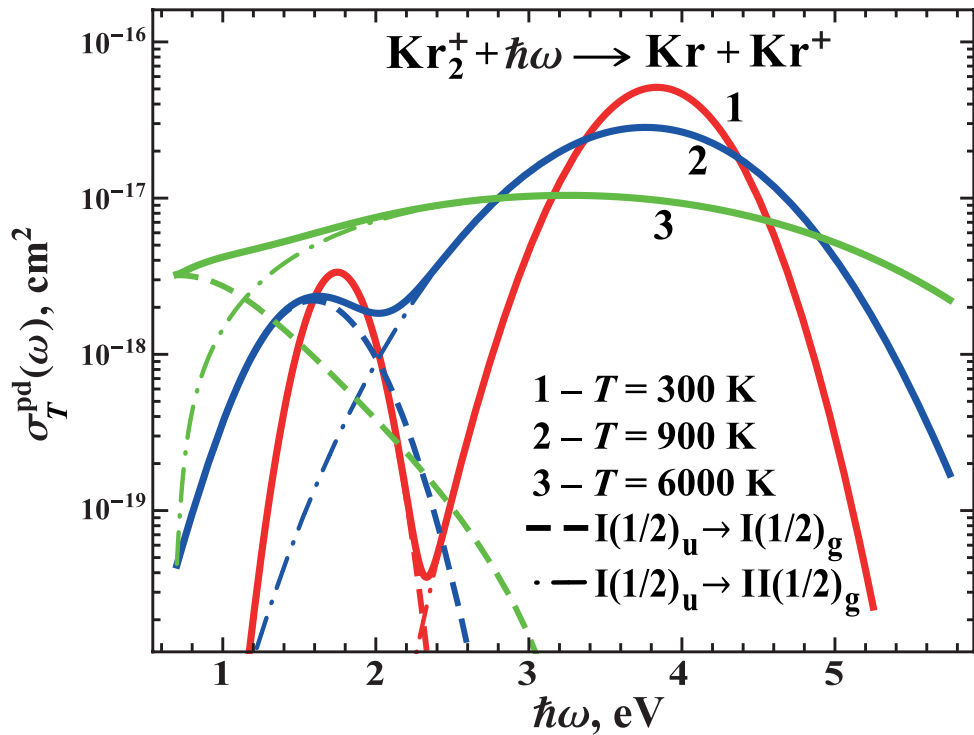


Рис. 6.3: Полные сечения фотодиссоциации ионов Kr_2^+ при температурах $T = 300, 900$ и 6000 K .

но высокой точностью расчетов параметров электронных термов, в частности, величины основного колебательного кванта или положения равновесия R_e .

Полные сечения фотодиссоциации ионов Kr_2^+ приведены на рисунке 6.3 для $T = 300, 900$ и 6000 K . Полученные результаты указывают на то, что увеличение газовой температуры приводит к кардинальному изменению как величин сечений, так и характерного вида их профиля. Так, при комнатных температурах в сечениях наблюдаются два резких пика, положение которых определяется структурой электронных термов системы. При $T = 900 \text{ K}$ происходит эффективное перекрытие пиков, приводящее к возникновению небольшого плато в диапазоне энергий $1.5 - 2.5 \text{ eV}$. При высоких температурах в сечениях отсутствуют особенности в изучаемом диапазоне частот фотона.

6.3. Относительная эффективность свободно-свободных фотопереходов

В рамках исследования малоизученного механизма радиационных свободно-свободных переходов представляет интерес его сравнение с традиционным механизмом фотодиссоциации. На рисунке 6.4 приведены графики отношения $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)/\eta_T^{\text{pd}}(\omega)$ коэффициентов сравниваемых процессов для ионов Kr_2^+ , рас-

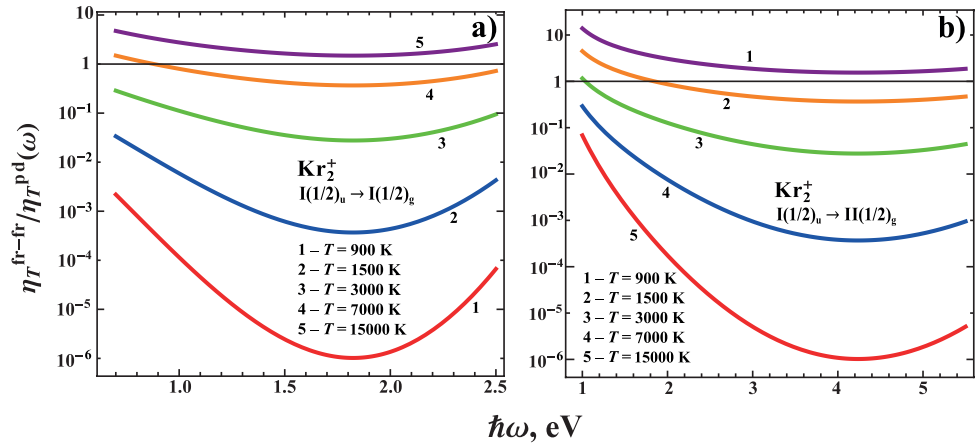


Рис. 6.4: Отношение $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)/\eta_T^{\text{pd}}(\omega)$ коэффициентов свободно-свободных радиационных процессов к коэффициентам фотодиссоциации с участием молекулярных ионов Kr_2^+ в результате неадиабатических переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ (а) и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ (б) при газовых температурах $T=900$ К (кривые 1), 1500 К (кривые 2), 3000 К (кривые 3), 7000 К (кривые 4) и 15000 К (кривые 5).

считанные с помощью формул (6.11) и (6.13). Из рисунка следует, что при температурах $T \lesssim 3000$ К механизм фотодиссоциации на несколько порядков превосходит механизм свободно-свободных переходов. Однако, по мере увеличения газовой температуры относительная эффективность свободно-свободного процесса стремительно возрастает, поскольку растет вероятность нахождения квазимолекулярного иона в состоянии непрерывного спектра. Отсюда следует, что эффективность свободно-свободных радиационных переходов при прочих равных условиях оказывается тем выше, чем меньше энергия диссоциации D_0 молекулярных ионов. При $T \gtrsim 3000$ К свободно-свободный процесс вносит значительный вклад в фотопоглощение, становясь определяющим при $T \gtrsim 10000$ К. Из рисунка 6.4 также видно, что величина $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)/\eta_T^{\text{pd}}(\omega)$ имеет явно выраженные минимумы при частотах, соответствующих неадиабатическим переходам, происходящим вблизи положения равновесия ионов R_e . При этом отношение $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)/\eta_T^{\text{pd}}(\omega)$ быстро растет по мере удаления от минимума в инфракрасную и ультрафиолетовую область. Причина состоит в том, что процессы поглощения излучения очень низких и очень высоких частот происходят вдали от положения равновесия R_e , где гораздо выше вероятность для иона находиться в свободном состоянии по ядерному движению.

Важно отметить, что в рамках проведенного нами сравнительного анализа свободно-свободных процессов и фотодиссоциации применяется формула Саха-Больцмана для отношения концентраций $[N_{A_2+}]/([N_A][N_{A+}])$, что подразумевает равновесие плазмы по ядерному движению.

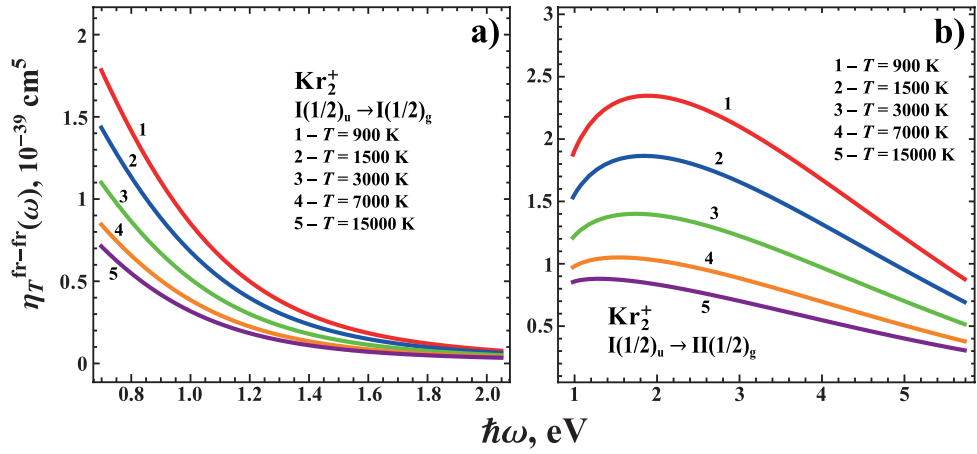


Рис. 6.5: Коэффициент фотопоглощения $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$ [cm^5], обусловленный свободно-свободными переходами $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ (а) и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ (б) в квазимолекулярном ионе Kr_2^+ при газовых температурах $T=900$ К (кривые 1), 1500 К (кривые 2), 3000 К (кривые 3), 7000 К (кривые 4) и 15000 К (кривые 5).

6.4. Коэффициент поглощения света при свободно-свободных фотопереходах

В рамках представленного в статье исследования нами были осуществлены расчеты констант скоростей, $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$ [cm^5], ранее почти не изученных радиационных свободно-свободных переходов с участием (квази-)молекулярных ионов. Результаты расчетов представлены на рисунке 6.5. Как следует из приведенных графиков, зависимость коэффициентов $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$ от частоты внешнего излучения ω существенно отличается от аналогичной зависимости сечений фотодиссоциации $\sigma^{\text{pd}}(\omega, T)$ от ω . Ключевое различие состоит в том, что у коэффициентов $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$ не наблюдается явно выраженный пороговый характер, связанный с преимущественной локализацией ионов вблизи положения равновесия R_e . Локальные максимумы, наблюдаемые для переходов $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ у ионов Kr_2^+ и Xe_2^+ вблизи $\hbar\omega \approx 2$ эВ, обусловлены не спецификой электронных термов, а формой кривых $|d_{fi}(R)[I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g]|^2$, имеющих свои максимумы. В случае же переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ максимумы вовсе не наблюдаются ни в одном из рассматриваемых случаев; эффективность свободно-свободных переходов растет по мере уменьшения частоты внешнего излучения.

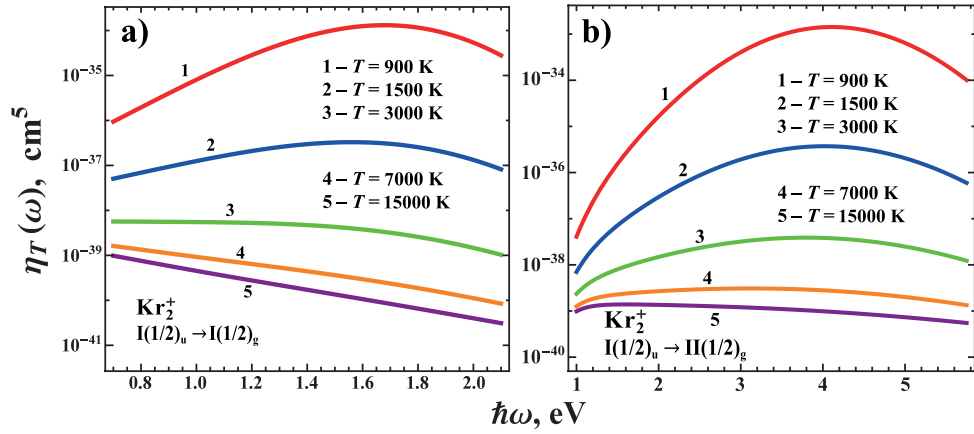


Рис. 6.6: Полные константы скорости $\eta_T(\omega) = \eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) + \eta_T^{\text{phd}}(\omega)$ фотопоглощения ионов Kr_2^+ в результате связанно-свободных и свободно-свободных переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ при газовых температурах $T=900$ К (кривые 1), 1500 К (кривые 2), 3000 К (кривые 3), 7000 К (кривые 4) и 15000 К (кривые 5).

6.5. Суммарный коэффициент поглощения света в результате связанно-свободных и свободно-свободных фотопереходов

В диссертационной работе были также рассчитаны полные константы скорости $\eta_T(\omega) = \eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega) + \eta_T^{\text{pd}}(\omega)$ фотопоглощения ионов Kr_2^+ в результате связанно-свободных и свободно-свободных переходов $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$ и $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$. Соответствующие результаты расчетов приведены на рисунке 6.6. Из них видно, что при низких температурах $T \lesssim 3000$ К константы скорости $\eta_T(\omega)$ имеют профиль, совпадающий с профилем сечений фотодиссоциации, с явно выраженным максимумом при частотах, соответствующих неадиабатическим переходам вблизи R_e . При дальнейшем увеличении температуры $T \gtrsim 7000$ К профиль кардинально меняется, приобретая вид, характерный для констант скорости $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$ свободно-свободных переходов. В таких условиях определяющий вклад в фотопоглощение вносят переходы, происходящие на больших межъядерных расстояниях $R \gg R_e$ и сопровождающиеся малой передачей энергии $\hbar\omega \lesssim 1$ эВ. Отметим, что описанные наблюдения напрямую следуют из результатов, представленных на рисунке 6.4, где демонстрируется роль исследуемых радиационных процессов при различных газовых температурах.

6.6. Краткие выводы

Выполнено теоретическое исследование процесса фотодиссоциации в криптоновой плазме при условиях, характерных для послесвечений разрядов. Установлено сильное количественное и качественное изменение поведения сечений указанного процесса при увеличении газовой температуры. Получено хорошее согласие теории с существующими экспериментальными данными. Результаты работы важны для моделирования и оптимизации работы источников излучения УФ- и ВУФ-диапазонов.

В широком диапазоне газовых температур исследованы особенности в спектрах фотодиссоциации молекулярных ионов Kr_2^+ . Показано, что в случае достаточно низких газовых температур $T \lesssim 1000$ К у сечений и коэффициентов поглощения света наблюдается явно выраженный максимум в области энергий квантов $\hbar\omega \gtrsim 1$ эВ. Его положение определяется спецификой и величиной расщепления электронных термов иона, между которыми происходят неадиабатические переходы. Установлено, что повышение газовой температуры приводит к радикальному изменению частотной зависимости сечений процесса: максимум сечений становится более пологим, а его положение смещается в сторону низких энергий квантов. Дано простое физическое объяснение температурной зависимости сечений.

Осуществлен теоретический анализ ранее не изученного резонансного радиационного процесса свободно-свободных переходов. Получено аналитическое выражение для коэффициента $\eta_T^{\text{fr}-\text{fr}}(\omega)$ [cm^5] указанного процесса. Проведен сравнительный анализ эффективности резонансных радиационных процессов фотодиссоциации и свободно-свободных переходов в криптоновой плазме в условиях равновесия по ядерному движению. Показано, что при низкой газовой температуре $T \lesssim 1000$ К механизм фотодиссоциации ионов Kr_2^+ является доминирующим неадиабатическим фотопроцессом, но при дальнейшем повышении T начинает усиливаться роль свободно-свободных радиационных переходов, которые начинают преобладать при $T \gtrsim 5000$ К.

Заключение

Основные результаты диссертации можно сформулировать следующим образом:

1. В рамках теории неадиабатического обмена энергии электронов и фотонов с молекулярными ионами и квазимолекулярными ионами, образующимися в ходе столкновения атомарных ионов с атомами буферного или собственного газа, получены полуаналитические выражения для сечений и констант скоростей ряда резонансных свободно-связанных, связанно-связанных и свободно-свободных переходов. Они определяют кинетику электрон-ионной рекомбинации и релаксации энергии электронного возбуждения по атомным уровням и коэффициенты поглощения света в плазме смесей инертных газов.
2. Для гетероядерных (ArXe^+ и NeXe^+) и гомоядерных (Ne_2^+ , Ar_2^+ , Kr_2^+ и Xe_2^+) ионов инертных газов в условиях теплового возбуждения всех колебательно-вращательных уровней выполнены конкретные расчеты сечений и констант скоростей процессов фотодиссоциации, прямой диссоциации электронным ударом и диссоциативной рекомбинации с образованием атомов в ридберговских состояниях. Установлены основные закономерности в поведении указанных величин в широком диапазоне энергий и температур электронной и ионной компонент плазмы ($T_e = 100 - 80000$ К, $T = 100 - 15000$ К), а также в зависимости от значения энергии диссоциации иона D_0 в диапазоне от 30 мэВ до 1 эВ.
3. Исследована относительная эффективность процессов диссоциативной рекомбинации гомоядерных Xe_2^+ и гетероядерных RgXe^+ ($\text{Rg} = \text{Kr}, \text{Ar}, \text{Ne}$) ионов в заселении ридберговских уровней атомов Хе в плазме смесей инертных газов Rg/Xe . Показано, что роль гетероядерных ионов при заселении уровней с $n \geq 8$ является преобладающей, если их концентрация на порядок величины превышает концентрацию ионов Xe_2^+ .

4. Наряду с резонансными процессами трехчастичного захвата электронов ионами при столкновениях с атомами инертного газа в рамках импульсного приближения построена теория нерезонансного захвата электронов на высоковозбужденные уровни атомов. Выяснена роль этих процессов в различных областях главного квантового числа и проведено сравнение их эффективности с традиционным механизмом тройной рекомбинации при столкновениях со свободными электронами. Показано, что в случае умеренносвязанных и сильносвязанных ионов ($D_0 \gtrsim 0.1 - 1$ эВ) резонансные процессы вносят доминирующий вклад в заселение уровней атомов инертных газов с $n \lesssim 15$ даже при степенях ионизации плазмы $\alpha \lesssim 10^{-5}$.
5. В широкой области температур исследована роль резонансных процессов диссоциативной рекомбинации и прямого диссоциативного возбуждения электронным ударом гетероядерных и гомоядерных ионов с сильно отличающимися друг от друга значениями энергии диссоциации D_0 . Показано, что в случае слабосвязанных ионов (NeXe^+) процесс диссоциативного возбуждения является преобладающим во всем рассмотренном диапазоне температур. Установлено, что для умеренносвязанных и сильносвязанных ионов (ArXe^+ , Ar_2^+ и Xe_2^+) процесс диссоциативного возбуждения оказывается неэффективным при $T_e \lesssim 1000$ К, но доминирует при высоких температурах ($T_e \gtrsim 5000$ К для ArXe^+ и $T_e \gtrsim 20000$ К для Ar_2^+ и Xe_2^+).
6. Выполнены расчеты интегрального вклада всех колебательно-вращательных уровней молекулярного иона Kr_2^+ в сечение фотодиссоциации и в соответствующий коэффициент фотодиссоциационного поглощения света в квазиравновесной криптоновой плазме. Установлены основные закономерности в поведении этого процесса в зависимости от частоты фотона в широком диапазоне температур. Рассчитан и проанализирован вклад неадиабатических свободно-свободных переходов в результирующий коэффициент фотопоглощения. Показано, что роль этого процесса становится существенной при высоких температурах $T \gtrsim 3000 - 5000$ К.

Благодарности

Работа выполнена в Отделении оптики ФИАН. Автор выражает искреннюю благодарность своему научному руководителю Владимиру Сергеевичу Лебедеву за формулировку темы и постановку конкретных задач диссертации, за совместный анализ полученных результатов, а также за постоянную помощь, направление и поддержку на протяжении всего времени выполнения работы. Автор весьма признателен своему научному консультанту, старшему научному сотруднику лаборатории «Оптика наноструктур и атомно-молекулярных систем» ФИАН Нарицу Александру Александровичу за ценные советы, замечания и большую помощь в конкретной работе. Автору приятно выразить искреннюю благодарность всем сотрудникам Отделения Оптики ФИАН за интерес к работе и конструктивное обсуждение полученных в диссертации результатов.

Список публикаций автора по теме диссертации

Статьи в рецензируемых журналах:

1. V.S. Lebedev, K.S. Kislov and A.A. Narits / Rydberg states population via three-body and dissociative recombination in low-temperature plasmas of rare gas mixtures // Plasma Sources Sciences and Technology – 2020. – V. 29. – No. 2 – P. 025002. doi 10.1088/1361-6595/ab652f
2. A.A. Narits, K.S. Kislov, V.S. Lebedev / Semiclassical Theory of Resonant Dissociative Excitation of Molecular Ions by Electron Impact // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics – 2020. – V. 53. – No 19 – P. 195201. doi 10.1088/1361-6455/aba3a7
3. В.С. Лебедев, К.С. Кислов, А.А. Нарич / Резонансный захват электронов ионами в ридберговские состояния атомов // ЖЭТФ – 2020. – Т. 157. – Вып. 3. – С. 579–595.
4. К.С. Кислов, А.А. Нарич, В.С. Лебедев / Анализ эффективностей процессов захвата электронов ионами в ридберговские состояния и неупругих переходов $n-p'$ в плазме смесей инертных газов // Оптика и спектроскопия – 2020 – Т. 128. – Вып. 4. – С. 462–479. doi 10.21883/OS.2020.04.49195.319-19
5. К.С. Кислов, А.А. Нарич, В.С. Лебедев / Прямое диссоциативное возбуждение гетероядерных и гомоядерных ионов инертных газов электронным ударом // Оптика и спектроскопия – 2020. – Т. 128. – № 11 – С. 1596-1612. doi 10.21883/OS.2020.11.50161.171-20
6. К.С. Кислов, А.А. Нарич, В.С. Лебедев / Температурные зависимости сечений фотодиссоциации в криптоновой плазме // Краткие сообщения по физике – 2020 – № 10, С 24-30. Опубликовано онлайн ksf.lebedev.ru/contents.php?post=1&year=2020&number=10&pages=&z=0

7. A.A. Narits, K.S. Kislov, V.S. Lebedev / Electron capture to the Rydberg atomic states in ternary collisions with neutral particles // Journal of Physics: Conference Series – 2020. – Vol. 1412. – No. 19. – P. 192007. doi 10.1088/1742-6596/1412/19/192007
8. K.S. Kislov, A.A. Narits, V.S. Lebedev / Strong enhancement of electron-ion recombination induced by free-bound and bound-bound resonance transitions // Journal of Physics: Conference Series – 2020. – Vol. 1412. – No. 19. – P. 192008. doi 10.1088/1742-6596/1412/19/192008

Тезисы докладов на конференциях

1. К.С. Кислов, А.А. Наритц, В.С. Лебедев. Анализ эффективностей резонансного механизма электрон-ионной рекомбинации в тройных столкновениях с атомами буферного газа и процесса диссоциативной рекомбинации. «Импульсная Сильноточная Вакуумная и Полупроводниковая Электроника» ИСВПЭ-2017 (19-20 октября 2017, ФИАН) Сборник трудов сс. 19 – 22
2. К.С. Кислов, А.А. Наритц, В.С. Лебедев. «Исследование процессов резонансной трехчастичной и диссоциативной электрон-ионной рекомбинации в плазме, содержащей атомарные и молекулярные ионы». 60-я Всероссийская научная конференция МФТИ (МФТИ-60), ФИАН, 23 ноября. Сборник трудов сс. 99 – 101
3. К.С. Кислов, А.А. Наритц, В.С. Лебедев. «Образование атомов в ридберговских состояниях в тройных столкновениях электрон–ион–атом». МФТИ-60, ФИАН, 23 ноября. Сборник трудов сс. 101 – 102
4. A.A. Narits, K.S. Kislov and V.S. Lebedev. Resonant Electron Transfer and Capture Processes Involving Rydberg Atoms. MIPT-UEC-LPI-2018. Moscow Institute of Physics and Technology, P.N.Lebedev Physical Institute. Proceedings p. 16
5. V.S. Lebedev, K.S. Kislov and A.A. Narits. The Mechanism of Resonant Electron Capture by Atomic and Weakly Bound Molecular Ions to the Rydberg States. MIPT-UEC-LPI-2018. Moscow Institute of Physics and Technology, P.N.Lebedev Physical Institute. Proceedings pp. 16-17

6. A.A. Narits, K.S. Kislov, V.S. Lebedev. Electron Capture to the Rydberg Atomic States in Ternary Collisions with Neutral Particles. XXXI International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions. Deauville, France, July 23-30, 2019. Proceedings p. 192
7. К.С. Кислов, В.С. Лебедев, А.А. Нарич. Исследование альтернативных механизмов захвата электронов атомарными ионами в тройных столкновениях с атомами буферного газа. Школа молодых ученых БПИО-2019, 12-14 ноября, Колонный Зал ФИАН. Сборник трудов сс. 28-32
8. К.С. Кислов, В.С. Лебедев, А.А. Нарич. Расчет констант скоростей диссоциативной рекомбинации гомоядерных и гетероядерных ионов инертных газов с образованием атомов ксенона в ридберговских состояниях. Школа молодых ученых БПИО-2019, 12-14 ноября, Колонный Зал ФИАН. Сборник трудов сс. 32-35
9. К.С. Кислов, В.С. Лебедев, А.А. Нарич. Кинетическая модель расчета коэффициента электрон-ионной рекомбинации при наличии многоступенчатых переходов и резонансного захвата электронов в ридберговские состояния атомов. Школа молодых ученых БПИО-2019, 12-14 ноября, Колонный Зал ФИАН. Сборник трудов сс. 50-52
10. К.С. Кислов, В.С. Лебедев, А.А. Нарич. Сравнение эффективностей различных механизмов захвата электронов ионами в высоковозбужденные состояния атомов при столкновениях с электронами и нейтральными частицами плазмы. 62-я Всероссийская научная конференция МФТИ (МФТИ-62), ФИАН, 18 ноября 2019. Сборник трудов сс. 169-170
11. К.С. Кислов, В.С. Лебедев, А.А. Нарич. Роль резонансной тройной и диссоциативной рекомбинации в двухтемпературной и существенно неравновесной плазме смесей Ne/Xe, Ar/Xe и Kr/Xe. МФТИ-62, ФИАН, 18 ноября 2019. Сборник трудов сс. 170-172

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Piel A. Plasma physics: an introduction to laboratory, space, and fusion plasmas. — Springer, 2017.
- [2] Иванов В. А., Скобло Ю. Э., Петровская А. С. Энергия связи и диссоциативная рекомбинация ионов Ne^+ и HeNe^+ . // ЖЭТФ. — 2019. — Т. 155, № 5. — С. 901–913.
- [3] Smirnov B. M. Microphysics of Atmospheric Phenomena. — Springer, 2017.
- [4] Srećković V., Mihajlov A., Ignjatović L. M., Dimitrijević M. Ion-atom radiative processes in the solar atmosphere: quiet sun and sunspots // Adv. Space Res. — 2014. — Vol. 54, no. 7. — P. 1264–1271.
- [5] Suazo M., Prieto J., Escala A., Schleicher D. R. The role of gas fragmentation during the formation of supermassive black holes // The Astrophysical Journal. — 2019. — Vol. 885, no. 2. — P. 127.
- [6] Coppola C. M., Longo S., Capitelli M. et al. Vibrational level population of H_2 and H_2^+ in the early universe // The Astrophysical Journal Supplement Series. — 2011. — Vol. 193, no. 1. — P. 7.
- [7] Cooley J. E., Urdahl R., Xue J. et al. Properties of microplasmas excited by microwaves for VUV photon sources // Plasma Sources Sci. Technol. — 2015. — Vol. 24, no. 6. — P. 065009.
- [8] Emmons D., Weeks D. Kinetics of high pressure argon-helium pulsed gas discharge // Journal of Applied Physics. — 2017. — Vol. 121, no. 20. — P. 203301.
- [9] Emmons D., Weeks D., Eshel B., Perram G. Metastable $\text{Ar}(1s5)$ density dependence on pressure and argon-helium mixture in a high pressure radio frequency dielectric barrier discharge // Journal of Applied Physics. — 2018. — Vol. 123, no. 4. — P. 043304.

- [10] Hoskinson A. R., Gregorío J., Hopwood J. et al. Argon metastable production in argon-helium microplasmas // *Journal of Applied Physics*. — 2016. — Vol. 119, no. 23. — P. 233301.
- [11] Sun P., Zuo D., Mikheyev P. A. et al. Time-dependent simulations of a CW pumped, pulsed DC discharge Ar metastable laser system // *Optics express*. — 2019. — Vol. 27, no. 16. — P. 22289–22301.
- [12] Apruzese J., Giuliani J., Wolford M. et al. Experimental evidence for the role of Xe_2^+ in pumping the Ar–Xe infrared laser // *Applied physics letters*. — 2006. — Vol. 88, no. 12. — P. 121120.
- [13] Минеев А., Нефедов С., Пащинин П. et al. Планарные ИК-лазеры с ВЧ-накачкой на смесях инертных газов // *Вестник Воздушно-Космической Обороны*. — 2018. — no. 1. — P. 78–82.
- [14] Ivanov V., Lebedev V., Marchenko V. Collision quenching of rydberg atomic levels and electron-ion recombination in a noble buffer gas // *Soviet Physics-JETP*. — 1988. — Vol. 67, no. 11. — P. 2225–2234.
- [15] Лебедев В. С., Кислов К. С., Нарич А. А. Сильный рост скорости электрон-ионной рекомбинации в результате свободно-связанных и связанно-связанных резонансных переходов // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 2018. — Т. 108, № 9-10. — С. 618–624.
- [16] Lebedev V. S., Beigman I. L. *Physics of highly excited atoms and ions*. — Springer Science & Business Media, 2012. — Vol. 22.
- [17] Lebedev V. Ionization of rydberg atoms by neutral particles. I. mechanism of the perturber-quasifree-electron scattering // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 1991. — Vol. 24, no. 8. — P. 1977.
- [18] Герасимов Г. Н. Оптические спектры бинарных смесей инертных газов // *Успехи физических наук*. — 2004. — Т. 174, № 2. — С. 155–175.
- [19] Shubert V. A., Rednic M., Pratt S. T. Predissociation and dissociative ionization of rydberg states of Xe_2 and the photodissociation of Xe_2^+ // *The Journal of chemical physics*. — 2010. — Vol. 132, no. 12. — P. 124108.

- [20] Zehnder O., Merkt F. The low-lying electronic states of ArXe^+ and their potential energy functions // *The Journal of Chemical Physics*. — 2008. — Vol. 128, no. 1. — P. 014306.
- [21] Zhang C., Feng T., Raabe N., Rottke H. Strong-field ionization of xenon dimers: The effect of two-equivalent-center interference and of driving ionic transitions // *Physical Review A*. — 2018. — Vol. 97, no. 2. — P. 023417.
- [22] Liang Y.-N., Wang F., Guo J. Theoretical study on low-lying electronic states of Kr_2^+ , Xe_2^+ , and Rn_2^+ // *The Journal of Chemical Physics*. — 2013. — Vol. 138, no. 9. — P. 094319.
- [23] Lebedev V. S., Presnyakov L. Photodissociation from a manifold of rovibrational states and free-free absorption by a diatomic molecule // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2002. — Vol. 35, no. 21. — P. 4347.
- [24] Mastalerz R., Zehnder O., Reiher M., Merkt F. Spin-orbit coupling and potential energy functions of Ar_2^+ and Kr_2^+ by high-resolution photoelectron spectroscopy and ab initio quantum chemistry // *Journal of chemical theory and computation*. — 2012. — Vol. 8, no. 10. — P. 3671–3685.
- [25] Kramers H. A., Ter Haar D. Condensation in interstellar space // *Bulletin of the Astronomical Institutes of the Netherlands*. — 1946. — Vol. 10. — P. 137.
- [26] Jabłoński A. General theory of pressure broadening of spectral lines // *Physical Review*. — 1945. — Vol. 68, no. 3-4. — P. 78.
- [27] Bates D. Rate of formation of molecules by radiative association // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. — 1951. — Vol. 111, no. 3. — P. 303–314.
- [28] Wildt R. Continuous absorption by interstellar molecules. // *Astronomical Journal*. — 1949. — Vol. 54. — P. 139.
- [29] Bates D. R. The oscillator strength of H_2^+ , $1s\sigma - 2p\sigma$ // *The Journal of Chemical Physics*. — 1951. — Vol. 19, no. 9. — P. 1122–1124.
- [30] Bates D. Absorption of radiation by an atmosphere of H_2 —semi-classical treatment // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. — 1952. — Vol. 112, no. 1. — P. 40–44.

- [31] Bates D. R., Ledsham K., Stewart A. L. Wave functions of the hydrogen molecular ion // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. — 1953. — Vol. 246, no. 911. — P. 215–240.
- [32] Gingerich O., Noyes R., Kalkofen W., Cuny Y. The Harvard-Smithsonian reference atmosphere // Solar Physics. — 1971. — Vol. 18, no. 3. — P. 347–365.
- [33] Kurucz R. L. Atlas: A computer program for calculating model stellar atmospheres // SAO Special report. — 1970. — Vol. 309.
- [34] Оксьюк У. Д. Фотодиссоциация молекулярного иона водорода // Оптика и спектроскопия. — 1967. — Т. 23. — С. 213.
- [35] Dunn G. H. Photodissociation of H_2^+ and D_2^+ : Theory // Physical Review. — 1968. — Vol. 172, no. 1. — P. 1.
- [36] Argyros J. Photodissociation of H_2^+ : variation with temperature // Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics. — 1974. — Vol. 7, no. 15. — P. 2025.
- [37] Stancil P. Continuous absorption by He_2^+ and H_2^+ in cool white dwarfs // The Astrophysical Journal. — 1994. — Vol. 430. — P. 360–370.
- [38] Mihajlov A., Dimitrijevic M. Influence of ion-atom collisions on the absorption of radiation in white dwarfs // Astronomy and Astrophysics. — 1992. — Vol. 256. — P. 305–308.
- [39] Mihajlov A., Dimitrijevic M., Ignjatovic L. M. The contribution of ion-atom radiative collisions to the opacity of the solar atmosphere // Astronomy and Astrophysics. — 1993. — Vol. 276. — P. 187.
- [40] Lebedev V., Presnyakov L., Sobel'Man I. Photodissociative absorption by H_2^+ in the solar photosphere // Astronomy Reports. — 2000. — Vol. 44, no. 5. — P. 338–347.
- [41] Лебедев В., Пресняков Л., Собельмая И. Поглощение света в водородной плазме на связанно-свободных и свободно-свободных переходах системы Н-Н // Письма в ЖЭТФ. — 2000. — Т. 72, № 4. — С. 256–260.
- [42] Lebedev V. S., Presnyakov L. Photodissociation from a manifold of rovibrational states and free-free absorption by a diatomic molecule // Journal

- of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2002. — Vol. 35, no. 21. — P. 4347.
- [43] Kirby K. P., Van Dishoeck E. F. Photodissociation processes in diatomic molecules of astrophysical interest // *Advances in atomic and molecular physics*. — Elsevier, 1989. — Vol. 25. — P. 437–476.
- [44] Буреева Л., Лисица В. Возмущенный атом. — Москва: ИздАТ, 1997.
- [45] Neukammer J., Rinneberg H., Vietzke K. et al. Spectroscopy of rydberg atoms at $n \approx 500$: Observation of quasi-landau resonances in low magnetic fields // *Physical Review Letters*. — 1987. — Vol. 59, no. 26. — P. 2947.
- [46] Frey M., Hill S., Smith K. et al. Studies of electron-molecule scattering at microelectronvolt energies using very-high- n rydberg atoms // *AIP Conference Proceedings / American Institute of Physics*. — Vol. 360. — 1996. — P. 815–824.
- [47] Сороченко Р., Саломонович А. Гигантские атомы в космосе // *Природа*. — 1987. — № 11. — С. 82.
- [48] Dalgarno A. Rydberg atoms in astrophysics // *Rydberg states of atoms and molecules / Ed. by RF Stebbings, FB Dunning*. — 1985.
- [49] Лебедев В., Марченко В. Нерезонансное столкновительное перемешивание ридберговских уровней атома в модели псевдопотенциала Ферми // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 1985. — Т. 88, № 3. — С. 754–771.
- [50] Kaulakys B. Analytical expressions for cross sections of Rydberg–neutral inelastic collisions // *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*. — 1985. — Vol. 18, no. 6. — P. L167.
- [51] Lebedev V. S., Fabrikant I. I. Inelastic and quasielastic collisions of Rydberg atoms with the heavy rare-gas atoms // *Physical Review A*. — 1996. — Vol. 54, no. 4. — P. 2888.
- [52] Lebedev V. S., Fabrikant I. I. Semiclassical calculations of the l-mixing and n, l-changing collisions of Rydberg atoms with rare-gas atoms // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 1997. — Vol. 30, no. 11. — P. 2649.

- [53] Percival I., Richards D. The theory of collisions between charged particles and highly excited atoms // *Advances in Atomic and Molecular Physics*. — Elsevier, 1976. — Vol. 11. — P. 1–82.
- [54] Beigman I. L., Lebedev V. S. Collision theory of Rydberg atoms with neutral and charged particles // *Physics Reports*. — 1995. — Vol. 250, no. 3-5. — P. 95–328.
- [55] Mihajlov A. A., Ignjatović L. M., Djurić Z., Ljepojević N. The rate coefficients for the processes of $(n-n')$ -mixing in collisions of Rydberg atoms $H^*(n)$ with $H(1s)$ atoms // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2004. — Vol. 37, no. 22. — P. 4493—4506.
- [56] Mihajlov A. A., Ignjatović L. M., Dimitrijević M. S. Processes of $(n - n')$ -mixing in collisions of rydberg $H(n)$ atoms with $H(1)$ in the solar atmosphere // *Astronomy & Astrophysics*. — 2005. — Vol. 437, no. 3. — P. 1023–1027.
- [57] Mihajlov A., Srećković V., Ignjatović L. M., Dimitrijević M. Atom-rydberg-atom chemi-ionization processes in solar and db white-dwarf atmospheres in the presence of $(n - n')$ -mixing channels // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. — 2016. — Vol. 458, no. 2. — P. 2215–2220.
- [58] Vernazza J. E., Avrett E. H., Loeser R. Structure of the solar chromosphere. III-Models of the EUV brightness components of the quiet-sun // *The Astrophysical Journal Supplement Series*. — 1981. — Vol. 45. — P. 635–725.
- [59] Mihajlov A., Srećković V., Ignjatović L. M. et al. Influence of rydberg atom-atom collisional and $(n - n')$ -mixing processes on optical properties of astrophysical and low-temperature laboratory plasmas // *J. Phys. Conf. Ser.* — Vol. 810. — 2017. — P. 012058.
- [60] Mihajlov A., Ignjatović L. M., Srećković V., Djurić Z. The influence of $(n-n')$ -mixing processes in $He^*(n)+ He(1s2)$ collisions on $He^*(n)$ atoms' populations in weakly ionized helium plasmas // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2008. — Vol. 109, no. 5. — P. 853–862.
- [61] Srećković V., Mihajlov A., Ignjatović L. M., Dimitrijević M. Excitation and deexcitation processes in atom-Rydberg atom collisions in helium-rich white

- dwarf atmospheres // *Astronomy & Astrophysics*. — 2013. — Vol. 552. — P. A33.
- [62] Lebedev V. Ionization of rydberg atoms by neutral particles. II. mechanisms of the perturber-core scattering // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 1991. — Vol. 24, no. 8. — P. 1993.
- [63] Гуревич А., Питаевский Л. Коэффициент рекомбинации в плотной низкотемпературной плазме // *ЖЭТФ*. — 1964. — Т. 46, № 4. — С. 1281.
- [64] Graham W. G., Fritsch W., Hahn Y., Tanis J. Recombination of atomic ions. — New York: Springer Science & Business Media, 1992. — Vol. 296.
- [65] Vorob'ev V. Collisional three-body recombination in strongly coupled ultracold plasmas // *Physics of Plasmas*. — 2017. — Vol. 24, no. 7. — P. 073513.
- [66] Kotrík T., Dohnal P., Roučka Š. et al. Collisional-radiative recombination $\text{Ar}^{++} + e + e$: Experimental study at 77–180 K // *Physical Review A*. — 2011. — Vol. 83, no. 3. — P. 032720.
- [67] Bates D., Khare S. Recombination of positive ions and electrons in a dense neutral gas // *Proceedings of the Physical Society*. — 1965. — Vol. 85, no. 2. — P. 231.
- [68] Dohnal P., Rubovič P., Kotrík T. et al. Collisional-radiative recombination of Ar^+ ions with electrons in ambient helium at temperatures from 50 K to 100 K // *Physical Review A*. — 2013. — Vol. 87, no. 5. — P. 052716.
- [69] Glosík J., Dohnal P., Kálosi Á. et al. Electron-ion recombination in low temperature hydrogen/deuterium plasma // *The European Physical Journal Applied Physics*. — 2017. — Vol. 80, no. 3. — P. 30801.
- [70] Зельдович Б., Райзер Ю. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. — Москва: Наука, 1966.
- [71] Mihajlov A. A., Dimitrijević M. S., Djurić Z. Rate coefficients of collisional $\text{H}-\text{H}^*(n)$ ionization and $\text{H}-\text{H}-e$ and $\text{H}_2^+ - e$ recombination // *Physica Scripta*. — 1996. — Vol. 53, no. 2. — P. 159–166.
- [72] Mihajlov A., Ignjatovic L. M., Vasilijevic M., Dimitrijevic M. Processes of $\text{H}-\text{H}^+ - e$ and $\text{H}_2^+ - e$ recombination in the weakly-ionized layers of the solar

- atmosphere. // *Astronomy and Astrophysics*. — 1997. — Vol. 324. — P. 1206–1210.
- [73] Mihajlov A. A., Ignjatović L. M., Dimitrijević M. S., Djurić Z. Symmetrical chemi-ionization and chemi-recombination processes in low-temperature layers of helium-rich DB white dwarf atmospheres // *ApJS*. — 2003. — Vol. 147, no. 2. — P. 369–377.
- [74] Bardsley J., Biondi M. Dissociative recombination // *Advances in Atomic and Molecular Physics*. — Elsevier, 1970. — Vol. 6. — P. 1–57.
- [75] Mitchell J. The dissociation recombination of molecules // *Phys. Rep.* — 1990. — Vol. 186. — P. 216–248.
- [76] Florescu-Mitchell A., Mitchell J. Dissociative recombination // *Physics Reports*. — 2006. — Vol. 430, no. 5-6. — P. 277–374.
- [77] Larsson M., Orel A. E. Dissociative recombination of molecular ions. — Cambridge University Press Cambridge, 2008.
- [78] Guberman S. L. Dissociative recombination of molecular ions with electrons. — New York: Springer Science & Business Media, 2012.
- [79] Rowe B. R., Mitchell J. B. A., Canosa A. Dissociative recombination: theory, experiment, and applications. — New York: Springer Science & Business Media, 2012. — Vol. 313.
- [80] Mats L., Schneider I. et al. Dissociative Recombination: Theory, Experiments And Applications Iv. — Singapore: World Scientific, 2000.
- [81] Guberman S. L., International Conference on Dissociative Recombination: Theory E., Applications (1988: Lake Louise A., Mitchell J. B. A. Dissociative Recombination: Theory, Experiment and Applications. — Singapore: World Scientific, 1989.
- [82] Zipf E. C. The dissociative recombination of vibrationally excited N_2^+ ions // *Geophysical Research Letters*. — 1980. — Vol. 7, no. 9. — P. 645–648.
- [83] Rowe B., Gomet J., Canosa A. et al. A further study of HCO^+ dissociative recombination // *The Journal of Chemical Physics*. — 1992. — Vol. 96, no. 2. — P. 1105–1110.

- [84] Novotný O., Sivaraman B., Rebrion-Rowe C. et al. Recombination of polycyclic aromatic hydrocarbon photoions with electrons in a flowing afterglow plasma // *The Journal of Chemical Physics*. — 2005. — Vol. 123, no. 10. — P. 104303.
- [85] Cunningham A., Hobson R. Experimental measurements of dissociative recombination in vibrationally excited gases // *Physical Review*. — 1969. — Vol. 185, no. 1. — P. 98.
- [86] Auerbach D., Cacak R., Caudano R. et al. Merged electron-ion beam experiments. i. method and measurements of $(e-H_2^+)$ and $(e-H_3^+)$ dissociative-recombination cross sections // *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*. — 1977. — Vol. 10, no. 18. — P. 3797.
- [87] Phaneuf R., Havener C., Dunn G., Müller A. Merged-beams experiments in atomic and molecular physics // *Reports on Progress in Physics*. — 1999. — Vol. 62, no. 7. — P. 1143.
- [88] Datz S., Larsson M. Radiative lifetimes for all vibrational levels in the $X^1\sigma^+$ state of HeH^+ and its relevance to dissociative recombination experiments in ion storage rings // *Physica Scripta*. — 1992. — Vol. 46, no. 4. — P. 343.
- [89] Tanabe T., Katayama I., Inoue N. et al. Dissociative recombination of HeH^+ at large center-of-mass energies // *Physical review letters*. — 1993. — Vol. 70, no. 4. — P. 422.
- [90] Amitay Z., Zajfman D., Forck P. et al. Dissociative recombination of CH^+ : Cross section and final states // *Physical Review A*. — 1996. — Vol. 54, no. 5. — P. 4032.
- [91] Strömholm C., Danared H., Larson Å. et al. Imaging spectroscopy of recombination fragments of OH^+ // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 1997. — Vol. 30, no. 21. — P. 4919.
- [92] Mitchell J., Yousif F., Van der Donk P. et al. Super-dissociative recombination of H_2^+ ? // *International Journal of Mass Spectrometry and Ion Processes*. — 1995. — Vol. 149. — P. 153–160.

- [93] Chibisov M., Mitchell J., Van der Donk P. et al. Dissociative recombination of vibrationally excited H_2^+ ions: High-rydberg-state formation // *Physical Review A*. — 1997. — Vol. 56, no. 1. — P. 443.
- [94] Amitay Z., Baer A., Dahan M. et al. Dissociative recombination of vibrationally excited HD^+ : State-selective experimental investigation // *Physical Review A*. — 1999. — Vol. 60, no. 5. — P. 3769.
- [95] Krohn S., Lange M., Grieser M. et al. Rate coefficients and final states for the dissociative recombination of LiH^+ // *Physical review letters*. — 2001. — Vol. 86, no. 18. — P. 4005.
- [96] Hu X., Mitchell J., Lipson R. Resonance-enhanced multiphoton-ionization-photoelectron study of the dissociative recombination and associative ionization of Xe_2^+ // *Physical Review A*. — 2000. — Vol. 62, no. 5. — P. 052712.
- [97] Lipson R., Hu X., Mitchell J., Froese-Fischer C. Recombination studies of Xe following associative ionization of laser-excited Xe // *Journal of Physics Conference Series*. — Vol. 4. — 2005. — P. 216–223.
- [98] Ramos G., Schlamkowitz M., Sheldon J. et al. Observation of dissociative recombination of Ne_2^+ and Ar_2^+ directly to the ground state of the product atoms // *Physical Review A*. — 1995. — Vol. 51, no. 4. — P. 2945.
- [99] Ramos G., Sheldon J., Hardy K., Peterson J. Dissociative-recombination product states and the dissociation energy D_0 of Ne_2^+ // *Physical Review A*. — 1997. — Vol. 56, no. 3. — P. 1913.
- [100] Giusti-Suzor A., Lefebvre-Brion H. A multichannel quantum defect approach to molecular autoionization // *Chemical Physics Letters*. — 1980. — Vol. 76, no. 1. — P. 132–135.
- [101] Burke* P., Tennyson J. R-matrix theory of electron molecule scattering // *Molecular Physics*. — 2005. — Vol. 103, no. 18. — P. 2537–2548.
- [102] Rescigno T. N., McCurdy C. W., Orel A. E., Lengsfeld B. The complex kohn variational method // *Computational Methods for Electron–Molecule Collisions*. — Boston: Springer, 1995. — P. 1–44.
- [103] Schneider I. F., Strömholm C., Carata L. et al. Rotational effects in dissociative recombination: theoretical study of resonant mechanisms and comparison with

- ion storage ring experiments // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 1997. — Vol. 30, no. 11. — P. 2687–2705.
- [104] Takagi H. Rotational effects in the dissociative recombination process of $\text{H}_2^+ + e$ // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 1993. — Vol. 26, no. 24. — P. 4815–4832.
- [105] Chakrabarti K., Backodissa-Kiminou D., Pop N. et al. Dissociative recombination of electrons with diatomic molecular cations above dissociation threshold: Application to H_2^+ and HD^+ // *Physical Review A*. — 2013. — Vol. 87, no. 2. — P. 022702.
- [106] Kokoouline V., Greene C. H. Theory of dissociative recombination of D_3h triatomic ions applied to H_3^+ // *Physical Review Letters*. — 2003. — Vol. 90, no. 13. — P. 133201.
- [107] Larson Å., Orel A. Dissociative recombination of HeH^+ : product distributions and ion-pair formation // *Physical Review A*. — 1999. — Vol. 59, no. 5. — P. 3601.
- [108] Tanabe T., Katayama I., Ono S. et al. Dissociative recombination of isotopes with an ultra-cold electron beam from a superconducting electron cooler in a storage ring // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 1998. — Vol. 31, no. 7. — P. L297–L303.
- [109] Guberman S. L. The vibrational dependence of dissociative recombination: Cross sections for N_2^+ // *The Journal of Chemical Physics*. — 2013. — Vol. 139, no. 12. — P. 124318.
- [110] Little D., Chakrabarti K., Mezei J. Z. et al. Dissociative recombination of N_2^+ : An ab initio study // *Physical Review A*. — 2014. — Vol. 90, no. 5. — P. 052705.
- [111] Larson Å., Orel A. Wave-packet study of the products formed in dissociative recombination of HeH^+ // *Physical Review A*. — 2005. — Vol. 72, no. 3. — P. 032701.
- [112] Larson Å., Orel A. Ion-pair formation and product branching ratios in dissociative recombination of HD^+ // *Physical Review A*. — 2001. — Vol. 64, no. 6. — P. 062701.

- [113] Royal J., Orel A. Dissociative recombination of Ar_2^+ // Physical Review A. — 2006. — Vol. 73, no. 4. — P. 042706.
- [114] Иванов В. Диссоциативная рекомбинация молекулярных ионов в плазме инертных газов // Успехи физических наук. — 1992. — Т. 162, № 1. — С. 35–70.
- [115] Ландау Л., Лифшиц Е. Теоретическая физика, том 3: Квантовая механика. Нерелятивистская теория // книга. — 1989.
- [116] Bates D. Dissociative recombination // Physical Review. — 1950. — Vol. 78, no. 4. — P. 492.
- [117] Flannery M. Electron-ion and ion-ion recombination // Springer handbook of atomic, molecular, and optical physics / Ed. by G.W.F. Drake. — New York: Springer, 2006. — P. 799.
- [118] Ignjatović L. M., Mihajlov A. Rate coefficient for the chemi-ionization in slow $\text{Li}^*(n) + \text{Li}$ and $\text{Na}^*(n) + \text{Na}$ collisions // Physical Review A. — 2005. — Vol. 72, no. 2. — P. 022715.
- [119] Klyucharev A., Bezuglov N., Matveev A. et al. Rate coefficients for the chemi-ionization processes in sodium-and other alkali-metal geocosmical plasmas // New Astronomy Reviews. — 2007. — Vol. 51, no. 7. — P. 547–562.
- [120] Bates D. Super dissociative recombination // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 1991. — Vol. 24, no. 3. — P. 703.
- [121] Lukáč P., Mikuš O., Morva I. et al. Dependence of the dissociative recombination coefficient of molecular ions with electrons on the electron and gas temperatures // Plasma Sources Science and Technology. — 2012. — Vol. 21, no. 6. — P. 065002.
- [122] Lukáč P., Mikuš O., Morva I. et al. Electron and gas temperature dependences of the dissociative recombination coefficient of molecular ions with electrons // Plasma Sources Science and Technology. — 2011. — Vol. 20, no. 5. — P. 055012.
- [123] Orel A., Ngassam V., Roos J. et al. Resonances in dissociative recombination: Trends and patterns // Journal of Physics: Conference Series. — Vol. 192. — 2009. — P. 012006.

- [124] Иванов В., Петровская А., Скобло Ю. Заселение $2p^55s$ -уровней атома неона в плазме смеси HeNe. I. эволюция механизмов в разряде и послесвечении // Оптика и спектроскопия. — 2013. — Т. 114, № 5. — С. 750.
- [125] Иванов В., Петровская А., Скобло Ю. Заселение $2p^55s$ -уровней атома неона в плазме смеси HeNe. II. температурные зависимости парциальных коэффициентов рекомбинации ионов HeNe⁺ и электронов // Оптика и спектроскопия. — 2014. — Т. 117, № 6. — С. 896–896.
- [126] Иванов В. А., Петровская А., Скобло Ю. Спектроскопия послесвечения плазмы He-Ne // Оптика и спектроскопия. — 2017. — Т. 123, № 5. — С. 689–696.
- [127] Levin L., Moody S., Klosterman E. et al. Kinetic model for long-pulse XeCl laser performance // IEEE Journal of Quantum Electronics. — 1981. — Vol. 17, no. 12. — P. 2282–2289.
- [128] Ohwa M., Moratz T. J., Kushner M. J. Excitation mechanisms of the electron-beam-pumped atomic xenon ($5d \rightarrow 6p$) laser in Ar/Xe mixtures // Journal of Applied Physics. — 1989. — Vol. 66, no. 11. — P. 5131–5145.
- [129] Автаева С., Кулумбаев Э. Численный анализ подобия барьерных разрядов в смеси 0.95 Ne/0.05 Xe // Физика плазмы. — 2009. — Т. 35, № 4. — С. 366–380.
- [130] Belasri A., Harrache Z. Electrical approach of homogenous high pressure Ne/Xe/HCl dielectric barrier discharge for XeCl (308 nm) lamp // Plasma Chemistry and Plasma Processing. — 2011. — Vol. 31, no. 5. — P. 787.
- [131] O'Malley T. F. Some diabatic (quasistationary) states of small diatomic systems—projected atomic orbitals // The Journal of Chemical Physics. — 1969. — Vol. 51, no. 1. — P. 322–334.
- [132] Bardsley J. Temperature dependence of dissociative recombination // Physical Review A. — 1970. — Vol. 2, no. 4. — P. 1359.
- [133] Alford W. J., Hays G. N., Ohwa M., Kushner M. J. The effects of He addition on the performance of the fission-fragment excited Ar/Xe atomic xenon laser // Journal of applied physics. — 1991. — Vol. 69, no. 4. — P. 1843–1848.

- [134] Dasgupta A., Apruzese J., Zatsarinny O. et al. Laser transition probabilities in Xe I // *Physical Review A*. — 2006. — Vol. 74, no. 1. — P. 012509.
- [135] Yousif F., Mitchell J. Electron-impact dissociative excitation of H_2^+ : low energy studies // *Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters*. — 1995. — Vol. 34, no. 3. — P. 195–197.
- [136] Andersen L. H., Johnson P., Kella D. et al. Dissociative-recombination and excitation measurements with H_2^+ and HD^+ // *Physical Review A*. — 1997. — Vol. 55, no. 4. — P. 2799.
- [137] El Ghazaly M. A., Jureta J., Urbain X., Defrance P. Total cross sections and kinetic energy release for the electron impact dissociation of H_2^+ and D_2^+ // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2004. — Vol. 37, no. 12. — P. 2467.
- [138] Yousif F., Van der Donk P., Orakzai M., Mitchell J. Dissociative excitation and recombination of H_3^+ // *Physical Review A*. — 1991. — Vol. 44, no. 9. — P. 5653.
- [139] Tennyson J., Noble C. Low-energy electron- H_2^+ collisions: variation of resonance parameters with internuclear separation // *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*. — 1985. — Vol. 18, no. 1. — P. 155.
- [140] Takagi T. Dissociative recombination and excitation of H_2^+ , HD^+ , and D_2^+ , with electrons for various vibrational states // *Physica Scripta*. — 2002. — Vol. T96, no. 1. — P. 52.
- [141] Pop N., Mezei Z., Motapon O. et al. Reactive collisions of electrons with molecular cations: Application to H_2^+ , BeH^+ , BF^+ // *AIP Conference Proceedings* / AIP Publishing LLC. — Vol. 1796. — 2017. — P. 020014.
- [142] Stroe M., Fifirig M. Electron-induced processes in H_2^+ , D_2^+ and T_2^+ // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2009. — Vol. 42, no. 20. — P. 205203.
- [143] Varlan A., Duca M., Fifirig M. Competition between reaction channels in electron collisions of vibrationally excited H_2^+ // *Molecular Physics*. — 2010. — Vol. 108, no. 16. — P. 2093–2104.

- [144] Fifrig M., Stroe M. Dissociation of H_2^+ ions by collisions with electrons // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2011. — Vol. 44, no. 8. — P. 085202.
- [145] Orel A. Electron-impact dissociative excitation of H_3^+ // Physical Review A. — 1992. — Vol. 46, no. 3. — P. 1333.
- [146] Gorfinkiel J., Tennyson J. Electron- H_3^+ collisions at intermediate energies // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2004. — Vol. 37, no. 20. — P. L343.
- [147] Fifrig M., Stroe M. Dissociative excitation in electron collisions with HD^+ // Physica Scripta. — 2008. — Vol. 78, no. 6. — P. 065302.
- [148] Peverall R., Rosén S., Peterson J. R. et al. Dissociative recombination and excitation of O_2^+ : Cross sections, product yields and implications for studies of ionospheric airglows // The Journal of Chemical Physics. — 2001. — Vol. 114, no. 15. — P. 6679–6689.
- [149] Peterson J., Le Padellec A., Danared H. et al. Dissociative recombination and excitation of N_2^+ : Cross sections and product branching ratios // The Journal of Chemical Physics. — 1998. — Vol. 108, no. 5. — P. 1978–1988.
- [150] Nagy O., Ballance C., Berrington K. et al. Vibrational excitation of the N_2^+ first negative (0, 0), (1, 0) and (2, 0) bands by electron impact: a theoretical study using the r-matrix approach // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 1999. — Vol. 32, no. 16. — P. L469.
- [151] Иванов В. Разрушение молекулярных ионов Ar_2^+ при столкновениях с электронами плазмы. // Оптика и спектроскопия. — 1992. — Т. 73, № 3. — С. 637–646.
- [152] Ivanov V., Prikhodjko A. Dissociation of Xe_2^+ molecular ions by electrons in plasma // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 1991. — Vol. 24, no. 18. — P. L459.
- [153] Jonkers J., van de Sande M., Sola A. et al. The role of molecular rare gas ions in plasmas operated at atmospheric pressure // Plasma Sources Science and Technology. — 2003. — Vol. 12, no. 3. — P. 464.

- [154] Марченко В. Диссоциация гомоядерных ионов электронным ударом // ЖЭТФ. — 1983. — Т. 85, № 2. — С. 500.
- [155] Bultel A., van Ootegem B., Bourdon A., Vervisch P. Influence of Ar_2^+ in an argon collisional-radiative model // *Physical Review E*. — 2002. — Vol. 65, no. 4. — P. 046406.
- [156] Postel O. B., Cappelli M. A. Vacuum emission and breakdown characteristics of a planar He–Xe microdischarge // *Applied Physics Letters*. — 2000. — Vol. 76, no. 5. — P. 544–546.
- [157] Stebbings R., Dunning F. et al. Rydberg states of atoms and molecules. — Cambridge University Press, 1983.
- [158] O'Malley T. F. Extrapolation of electron-rare gas atom cross sections to zero energy // *Physical Review*. — 1963. — Vol. 130, no. 3. — P. 1020.
- [159] Viehland L. A., Gray B. R., Wright T. G. Interaction potentials, spectroscopy and transport properties of $\text{RG}^+\text{--He}$ ($\text{RG} = \text{Ar--Rn}$) // *Molecular Physics*. — 2009. — Vol. 107, no. 20. — P. 2127–2139.
- [160] Viehland L. A., Gray B. R., Wright T. G. Interactions of rare gas cations with lighter rare gas atoms // *Molecular Physics*. — 2010. — Vol. 108, no. 5. — P. 547–555.
- [161] Лебедев В. С., Пресняков Л. П., Собельман И. И. Радиационные переходы молекулярного иона H_2^+ // *Успехи физических наук*. — 2003. — Т. 173, № 5. — С. 491–510.
- [162] Derkits C., Bardsley J., Wadehra J. Dissociative recombination in $e\text{--H}_2^+$ collisions // *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*. — 1979. — Vol. 12, no. 17. — P. L529.
- [163] Zhdanov V. Dissociative recombination of $e\text{--H}_2^+$ collisions // *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*. — 1980. — Vol. 13, no. 9. — P. L311.
- [164] Lebedev V. S. *Collision Processes Involving Highly Excited Atoms and Neutral Particles*. — Cambridge Scientific Publishers, 2004.
- [165] Seaton M. Coulomb functions for attractive and repulsive potentials and for positive and negative energies // *Computer Physics Communications*. — 2002. — Vol. 146, no. 2. — P. 225–249.

- [166] Жданов В., Чибисов М. Диссоциативная рекомбинация электронов на молекулярных ионах H_2^+ и D_2^+ с образованием сильно возбужденных атомов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1978. — Т. 74, № 1. — С. 75–86.
- [167] Гореславский С., Делоне Н., Крайнов В. Вероятности радиационных переходов между высоковозбужденными атомными состояниями // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1982. — Т. 82, № 6. — С. 1789–1798.
- [168] Sobelman I. I. Atomic spectra and radiative transitions. — Springer Science & Business Media, 2012. — Vol. 12.
- [169] Sukhorukov V. L., Petrov I., Schäfer M. et al. Photoionization dynamics of excited Ne, Ar, Kr and Xe atoms near threshold // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2012. — Vol. 45, no. 9. — P. 092001.
- [170] Ngassam V., Orel A. Dissociative recombination of Ne_2^+ molecular ions // Physical Review A. — 2006. — Vol. 73, no. 3. — P. 032720.
- [171] Frommhold L., Biondi M. A., Mehr F. Electron-temperature dependence of electron-ion recombination in neon // Physical Review. — 1968. — Vol. 165, no. 1. — P. 44.
- [172] Lukáč P., Mikuš O., Morva I. et al. Electron and gas temperature dependences of the dissociative recombination coefficient of molecular ions with electrons // Plasma Sources Sci. Technol. — 2011. — Vol. 20, no. 5. — P. 055012.
- [173] Fox J., Hobson R. Temperature dependence of dissociative recombination coefficients in argon // Physical Review Letters. — 1966. — Vol. 17, no. 4. — P. 161.
- [174] Michels H. H., Hobbs R., Wright L. Electronic structure of the noble gas dimer ions. I. Potential energy curves and spectroscopic constants // The Journal of Chemical Physics. — 1978. — Vol. 69, no. 11. — P. 5151–5162.
- [175] Weyhreter M., Barzick B., Mann A., Linder F. Measurements of differential cross sections for $e\text{-Ar}$, Kr , Xe scattering at $e = 0.05 - 2$ eV // Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters. — 1988. — Vol. 7, no. 4. — P. 333–347.

- [176] Gulley R., Alle D., Brennan M. et al. Differential and total electron scattering from neon at low incident energies // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 1994. — Vol. 27, no. 12. — P. 2593.
- [177] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. *Физическая кинетика*. — Москва: Физматлит, 2002. — Т. 10.
- [178] Биберман Л. М., Воробьев В., Якубов И. *Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы*. — Москва: Наука, 1982.
- [179] Gounand F., Petitjean L. Binary-encounter form factor and its use in the calculation of inelastic cross sections involving Rydberg atoms // *Physical Review A*. — 1984. — Vol. 30, no. 1. — P. 61.
- [180] Абрамовиц М., Стиган И. *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и таблицами*. — Москва: Наука, 1979.
- [181] Park S.-J., Herring C., Mironov A. et al. 25 W of average power at 172 nm in the vacuum ultraviolet from flat, efficient lamps driven by interlaced arrays of microcavity plasmas // *APL Photonics*. — 2017. — Vol. 2, no. 4. — P. 041302.
- [182] Schütte B., Campi F., Arbeiter M. et al. Tracing electron-ion recombination in nanoplasmas produced by extreme-ultraviolet irradiation of rare-gas clusters // *Physical Review Letters*. — 2014. — Vol. 112, no. 25. — P. 253401.
- [183] Apruzese J., Giuliani J., Wolford M. et al. Optimizing the Ar–Xe infrared laser on the Naval Research Laboratory’s Electra generator // *Journal of Applied Physics*. — 2008. — Vol. 104, no. 1. — P. 013101.
- [184] Минеев А. П., Дроздов А. П., Нефедов С. М. и др. Планарный Хе-лазер с непрерывной высокочастотной накачкой // *Квантовая электроника*. — 2012. — Т. 42, № 7. — С. 575–579.
- [185] Qu C., Tian P., Semnani A., Kushner M. J. Properties of arrays of microplasmas: application to control of electromagnetic waves // *Plasma Sources Science and Technology*. — 2017. — Vol. 26, no. 10. — P. 105006.
- [186] Lebedev V., Marchenko V. Transitions between highly excited states of an atom when a neutral particle moves near its core // *ЖЭТФ*. — 1983. — Vol. 57, no. 5. — P. 946–954.

- [187] Shiu Y.-J., Biondi M. A., Sipler D. P. Dissociative recombination in xenon: Variation of the total rate coefficient and excited-state production with electron temperature // *Physical Review A*. — 1977. — Vol. 15, no. 2. — P. 494.
- [188] Lee L., Smith G. Photodissociation cross sections of Ne_2^+ , Ar_2^+ , Kr_2^+ , and Xe_2^+ from 3500 to 5400 Å // *Physical Review A*. — 1979. — Vol. 19, no. 6. — P. 2329.