

539.184

**ВОЗБУЖДЕНИЕ И ИОНИЗАЦИЯ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ  
ЭЛЕКТРОНАМИ****В. А. Базылев, М. И. Чибисов**

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение . . . . .	617
1. Общая характеристика неупругих столкновений электронов с многозарядными ионами . . . . .	618
а) О применимости теории возмущений при возбуждении вблизи порога (618). б) Дипольное приближение (620). в) Резонансное возбуждение (623). г) Релятивистская постановка задачи (625).	
2. Возбуждение и ионизация водородоподобных ионов электронами . . . . .	627
а) Возбуждение водородоподобных ионов (627). б) Ионизация водородоподобных ионов (631). в) Скорости возбуждения и ионизации водородоподобных ионов (632).	
3. Энергии связанных состояний сложных многозарядных ионов . . . . .	633
4. Возбуждение дипольных переходов многозарядных ионов с малой энергией возбуждения . . . . .	634
а) Литиевоподобные ионы {Li}, переход $2s \rightarrow 2p$ (634). б) Бериллиевоподобные ионы {Be}, переход $1s^2 2s^2   ^1S \rightarrow 1s^2 2s 2p   ^1P$ (636). в) Натриевоподобные ионы {Na}, переход $3s \rightarrow 3p$ (638). г) Гелиевоподобные ионы {He}, переход $2'S \rightarrow 2'P$ , $2^3S \rightarrow 2^3P$ (638).	
5. Возбуждение переходов с $\Delta l \neq 0$ . . . . .	639
а) Гелиевоподобные ионы (639). б) Литиевоподобные ионы (644). в) Бериллиевоподобные ионы (646).	
6. Ионизация многозарядных ионов . . . . .	646
Заключение . . . . .	649
Цитированная литература . . . . .	650

## ВВЕДЕНИЕ

В последнее время с различными целями интенсивно изучается плазма при весьма большой температуре — порядка нескольких или даже десятка килоэлектронвольт. При такой температуре атомы легких элементов в плазме ободраны полностью, а атомы тяжелых элементов — частично. Многозарядные ионы, имеющие электроны, под действием частиц плазмы могут возбуждаться, что приводит к появлению линейчатого излучения, по которому можно судить о параметрах плазмы.

Общие свойства спектров многозарядных ионов и спектроскопия высокотемпературной плазмы рассмотрены в обзоре Преснякова<sup>1</sup>. В данном обзоре изложены результаты исследований неупругого рассеяния электронов на многозарядных ионах. Рассматриваются процессы возбуждения и ионизации.

Физика неупругого рассеяния электронов на многозарядных ионах имеет ряд интересных особенностей. Помимо прямого кулоновского возбуждения многозарядных ионов, а также их прямой ионизации, неупругое рассеяние электронов характеризуется возможностью образования в процессе столкновения долгоживущих, так называемых авто-

ионизационных состояний, распадающихся за время, значительно большее времен обращения электронов на своих орбитах. Такие состояния в ядерной физике получили название компаунд-ядер. При рассеянии электронов на многозарядных ионах образование автоионизационных состояний происходит путем возбуждения одного из связанных электронов иона и перехода налетающего электрона из непрерывного спектра в состояние дискретного спектра: Оже-распад такого состояния приводит к резонансному возбуждению многозарядного иона; либо — путем возбуждения электрона из внутренних оболочек иона: Оже-распад такого состояния приводит к ионизации многозарядных ионов.

Существенно также, что уже при достижимых в лабораторной плазме температурах в рассеянии электронов на многозарядных ионах начинают проявляться релятивистские эффекты. Поэтому специального освещения требуют весьма общие вопросы о роли магнитных взаимодействий и эффектов запаздывания в процессах возбуждения и ионизации многозарядных ионов при увеличении кратности иона.

Межэлектронное взаимодействие, являющееся причиной неупругих процессов, значительно слабее энергии взаимодействия электронов с многозарядным ионом. Это фундаментальное обстоятельство позволяет с единой точки зрения рассмотреть весь обширный круг вопросов, связанный с процессами неупругого рассеяния электронов на многозарядных ионах.

Сведения о результатах расчетов сечений возбуждения многозарядных ионов электронами методом Кулон — Борна имеются в книге Вайнштейна, Собельмана и Юкова<sup>2</sup>, где собраны оригинальные результаты этих авторов. В настоящее время имеется большое количество расчетов по возбуждению многозарядных ионов электронами, полученных другими методами. Вблизи порога возбуждения все используемые методы могут быть реализованы только численно; при этом особенно важна ясно выраженная точка зрения на методическую сторону вопроса: какова точность используемого метода, в каком случае и какие преимущества имеет данный метод перед другими и т. д.

## • ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА НЕУПРУГИХ СТОЛКНОВЕНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ С МНОГОЗАРЯДНЫМИ ИОНАМИ!

### а) О применимости теории возмущений при возбуждении вблизи порога<sup>\*)</sup>

Энергии связи основного и ближайших к основному возбужденных состояний многозарядных ионов одного изоэлектронного ряда можно считать пропорциональными  $Z_2^2$  (заряд иона  $Z_2 \gg 1$ )<sup>\*)</sup>. Для возбуждения ионов поэтому требуется энергия  $\sim Z_2^2$ , за исключением переходов без изменения главного квантового числа,  $\Delta n = 0$ . Для оправдания применимости теории возмущений по межэлектронному взаимодействию необходимо выяснить, какие межэлектронные расстояния существенны для возбуждения или ионизации.

В квантовой механике вклад в сечение вносят относительно большие межэлектронные расстояния, так что теория возмущений оказывается применимой<sup>3</sup>. Это следует из таких качественных соображений: при дальнедействующем характере кулоновского межэлектронного взаимодействия существенная область определяется длинами волн электронов

\*) Далее все величины измеряются в атомных единицах, в которых единицей энергии является 27,21 эВ, единицей массы — масса электрона, длины — борковский радиус  $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-9}$  см; сечение измеряется в единицах  $a_0^2 = 0,28 \cdot 10^{-16}$  см<sup>2</sup>.

(для связанного электрона это просто размер его волновой функции). Размер существенной области должен быть больше или порядка суммы длин волн обоих электронов. Иными словами, этот размер не может быть меньше размера волновой функции связанного электрона, который  $\sim E_{\text{св}}^{-1/2} \sim Z_2^{-1}$ .

Таким образом, в квантовой механике:

- а) эффективные межэлектронные расстояния больше или порядка  $Z_2^{-1}$ ;
- б) возможно использование теории возмущений по межэлектронному взаимодействию.

Этот же вывод оказывается справедливым и для переходов между вырожденными состояниями, что можно получить из оценок по теории возмущений для вырожденных состояний<sup>4</sup>.

В рассматриваемой задаче имеет место типичная ситуация: хотя по классической механике на расстояниях  $\sim Z_2^{-1}$  электроны не могут обменяться энергией  $\Delta E \sim Z_2^2$ , в квантовой механике такой обмен происходит, но с малой вероятностью, пропорциональной  $(V_{\text{ок}}/\Delta E)^2 \sim Z_2^2$ . Умножив эту вероятность на геометрическое поперечное сечение связанного состояния, получим, что эффективное сечение  $\sim Z_2^{-4}$ .

Таким образом, хорошо известное и часто используемое приближение Кулон — Борна (КБ) для вычисления сечения возбуждения многозарядных ионов электронами является строгой теорией возмущений по малому параметру  $Z_2^{-1} \ll 1$  вплоть до порога реакции. Поскольку требующаяся симметризация волновых функций по перестановкам электронов меняет их уже в нулевом приближении, то абсолютно строгой теорией возмущений является приближение Кулон — Борна с обменом (КБО). Заметим, что здесь, в отличие от приближения Борна — Оппенгеймера, волновые функции начального и конечного состояний ортогональны друг другу как волновые функции одного и того же гамильтониана.

Из других методов, широко используемых в литературе по расчетам сечений возбуждения многозарядных ионов, наиболее интересны метод возмущенных волн с поляризованными орбиталями и метод сильной связи. Остановимся на них вкратце.

В методе возмущенных волн с поляризованными орбиталями (см. <sup>25, 26</sup>) волновая функция налетающего электрона определяется не только с учетом поля иона, но и поля связанного электрона с включением корреляций между электронами. Однако при  $Z_2 \gg 1$  эти эффекты малы, они вносят вклад в более высокие порядки по параметру  $Z_2^{-1}$  и потому их учет без учета второго порядка теории возмущений по межэлектронному взаимодействию в действительности есть превышение точности (не приводящее, как будет видно ниже, к заметным количественным ошибкам).

Метод сильной связи означает следующее. Полная волновая функция системы ион + налетающий электрон раскладывается по волновым функциям иона. Коэффициенты этого разложения зависят от координат налетающего электрона, и их набор описывает состояние этого электрона, т. е. представляет собой его волновые функции. Получающаяся сумма симметризуется по перестановкам электронов. Затем в этой бесконечной сумме оставляется лишь несколько членов — несколько состояний, имеющих отношение к физике рассматриваемого перехода. В результате для вычисления сечения необходимо решить систему нескольких интегродифференциальных уравнений. Подробное описание метода сильной связи можно найти в книгах <sup>88, 89</sup>.

Метод сильной связи при учете более чем двух состояний означает учет переходов через несколько промежуточных состояний (например,  $1s \rightarrow 2p \rightarrow 2s$ ,  $1s \rightarrow 2s \rightarrow 2p$ ). При условии применимости теории возмущений, т. е. при существовании малого параметра ( $Z_2^{-1} \ll 1$ ), такой учет

может означать превышение точности — неполный учет второго приближения теории возмущений. Для полного вычисления второго приближения необходимо суммирование вкладов переходов через все промежуточные состояния. Учет же лишь некоторых из этих переходов может ухудшить конечный результат.

Таким образом, метод сильной связи при применимости теории возмущений, вообще говоря, не гарантирует улучшение результата по сравнению с приближением КБО с правильно выбранными волновыми функциями. Однако и этот метод для рассеяния на многозарядных ионах дает правильные результаты.

Из практики расчетов сечений возбуждения нейтральных атомов электронами известно, что при использовании борновского приближения вклад отдельных моментов может превышать теоретический предел. Поэтому большинство борновских расчетов с нейтральными атомами завышают сечения вблизи порога. Для устранения этого недостатка прибегают к искусственному приему — нормировке борновского приближения. Цель этой операции — ограничить вклад указанных выше методов теоретическим пределом. Согласно Ситону<sup>5</sup> для достижения этой цели следует вычислять матрицу реакции, что автоматически обеспечивает унитарность матрицы рассеяния. Согласно Вайнштейну, Собельману, Юкову<sup>2</sup> можно производить перенормировку вычисленного сечения. Оба способа равноценны и имеют смысл лишь тогда, когда борновское приближение существенно (в несколько раз) завышает результат.

В случае возбуждения многозарядных ионов электронами, когда работает строгая теория возмущений, вклады любых моментов не могут превышать теоретический предел. Поэтому в нормировке нет надобности. Ее применение означает лишь превышение точности, что, впрочем, мало сказывается на количественном результате.

### б) Д и п о л ь н о е   п р и б л и ж е н и е

При конкретных расчетах сечений возбуждения даже водородоподобных ионов не удается получить результат в аналитическом виде, так как для налетающего электрона необходимо использовать кулоновские функции непрерывного спектра, выражающиеся через вырожденную гипергеометрическую функцию. Поэтому для получения количественного результата используют численные методы, а для оценок часто используют дипольное приближение Бете<sup>6</sup>. В этом приближении в разложении межэлектронного взаимодействия по полиномам Лежандра

$$r_{12}^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r_{>}} \left( \frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^{l/2} P_l(\cos \theta) \quad (1)$$

(где  $r_{<} = \min(r_1, r_2)$ ,  $r_{>} = \max(r_1, r_2)$ ;  $\theta$  — угол между радиус-векторами  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$  связанного и налетающего электронов), оставляется только дипольный ( $l = 1$ ) член. Нулевой член ( $l = 0$ ) не дает вклада из-за ортогональности волновых функций.

Преобразуем дипольный член разложения (1) с помощью соотношений классической механики, справедливых в квантовой механике для матричных элементов:

$$r_{12}^{-1} \approx \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}{r_2^3} = -\frac{\Delta E^2}{Z_2} (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2). \quad (2)$$

В пренебрежении обменом в методе КБ использование (2) при вычислении сечений дипольных переходов позволяет заимствовать результат

Зоммерфельда <sup>7</sup>, полученный в теории тормозного излучения. А именно: из этой теории можно заимствовать дипольный матричный элемент между функциями непрерывного спектра. Таким путем сечения дипольных переходов ионов были получены и затабулированы Гайлитисом <sup>8</sup>.

Поскольку в рассматриваемом случае метод КБ является строгой теорией возмущений, то имеет смысл выяснить, в каких случаях упрощение этого метода — использование дипольного приближения (2) — также можно строго обосновать. Иными словами, необходимо найти случаи, когда сечение возбуждения определяется большими расстояниями налетающего электрона, большими, чем размер состояния связанного электрона, когда одновременно с использованием дипольности можно пренебречь обменом.

Далее будет показано, что к искомому относятся случаи малой передачи энергии  $\Delta E \ll Z_2^2$ , точнее,  $\Delta E$  много меньше потенциала ионизации возбуждаемого иона, т. е. случаи дипольных переходов между компонентами тонкой структуры и между состояниями без изменения главного квантового числа ( $\Delta n = 0$ ). Например, переходы  $2s \rightleftharpoons 2p$  в литиевоподобных ионах;  $2s^2 \rightarrow 2s2p$ ,  $2p^2 \rightarrow$  в бериллиевоподобных ионах и т. д. Указанные состояния расщеплены в результате различного обменного и других взаимодействий с остовными электронами, так что  $\Delta E \sim Z_2 \ll \ll Z_2^2$ .

Вычислим сечения таких переходов, считая налетающий электрон движущимся по классической кулоновской траектории — по гиперболе. Связанный электрон считаем квантовым. Обоснование всех приближений будет дано после получения результата.

При таком подходе сечение возбуждения равно

$$Q_{0n} = 2\pi \int_0^\infty \omega(\rho) \rho \, d\rho, \quad (3)$$

где вероятность возбуждения  $\omega(\rho)$  при дипольном взаимодействии (2) и заданном прицельном параметре  $\rho$  равна

$$\omega(\rho) = \frac{\Delta E^4}{Z_2^2} |(r_1)_{0n} (r_2(\Delta E, \rho))|^2; \quad (4)$$

здесь  $r_2(\Delta E, \rho)$  — фурье-компонента радиус-вектора налетающего электрона. Она вычислена в § 70 книги <sup>9</sup>. Получаем

$$\omega(\rho) = \frac{\Delta E^4}{Z_2^2} |(x_1)_{0n} (x_2(\Delta E, \rho)) + (y_1)_{0n} (y_2(\Delta E, \rho))|^2, \quad (5)$$

$$x_2(\Delta E, \rho) = \frac{\pi Z_2}{2E\Delta E} H_{iv}^{(1)'}(iv\varepsilon), \quad y_2 = -\frac{\pi Z_2 \sqrt{\varepsilon^2 - 1}}{2\varepsilon E\Delta E} H_{iv}^{(1)}(iv\varepsilon), \quad (6)$$

$$\varepsilon = \sqrt{1 + \left(\frac{2E\rho}{Z_2}\right)^2}, \quad v = \frac{Z_2 \Delta E}{(2E)^{3/2}}, \quad (7)$$

где  $x_{1,2}$  и  $y_{1,2}$  — координаты связанного электрона и налетающей частицы в плоскости траектории;  $H_{iv}^{(1)}$  — функция Ханкеля. Нас интересует вероятность, усредненная по начальным и просуммированная по конечным подсостояниям. Подсостояния относятся к разным проекциям моментов. В этом случае  $(x_1)_{0n}^2 = (y_1)_{0n}^2 = |d_{0n}|^2$ . Тогда тем же способом, что и при вычислении тормозного излучения <sup>9</sup>, получим сечение возбуждения:

$$Q_{0n} = \frac{\pi^3 f_{0n}}{(2l_0 + 1) \Delta E} \frac{F(v)}{v_c^2}, \quad (8)$$

$$F(v) = v |H_{iv}^{(1)}(iv)| |H_{iv}^{(1)'}(iv)| \quad (9)$$

( $l_0$  — орбитальный момент начального состояния), где  $f_{0n} = 2 \Delta E |d_{0n}|^2$  — сила осциллятора рассматриваемого перехода. Сечение оказалось выраженным через функцию от одной универсальной величины  $v$ .

Теперь найдем те условия, при которых справедлива формула (8); они определяются использованием классического приближения для налетающего электрона и дипольности взаимодействия.

Расстояние наименьшего сближения электрона с положительным ионом<sup>10</sup> равно

$$r_{\min} = \frac{Z_2}{2E} \left( \sqrt{1 + \left(\frac{2E\rho}{Z_2}\right)^2} - 1 \right). \quad (10)$$

Для получения критериев справедливости теории необходим анализ зависимости  $\omega(\rho)$  или, согласно (5) и (6), зависимости функции Ханкеля  $H_{1/2}^{(1)}(i v \epsilon)$  от  $\epsilon$ . Опуская тривиальные подробности этого анализа, приведем окончательные выводы. Траектории налетающего электрона имеют разную степень кривизны в зависимости от величины  $v$ . При  $v \gg 1$ , т. е. в припороговой области энергий, дипольность ( $r_{\min} \gg Z_2^{-1}$ ) и классичность (вклад в сечение вносят большие моменты налетающего электрона) выполняются при условии

$$\Delta E \ll Z_2^2. \quad (11)$$

Мы считали, что передача энергии  $\Delta E$  связанному электрону не сказывается на траектории налетающего электрона. Это справедливо, если энергия последнего в зоне реакции, т. е. при  $r_2 \sim r_{\min}$ , много больше  $\Delta E$ . При  $v \gg 1$

$$r_{\min} \approx \frac{Z_2^{1/3}}{6^{1/3} (\Delta E)^{2/3}}. \quad (12)$$

Отсюда видно, что требование  $Z_2/r_{\min} \gg \Delta E$  автоматически выполняется при выполнении условия (11) — при  $v \gg 1$  траектории искривляются сильно.

При  $v \sim 1$ ,  $v < 1$  и  $v \ll 1$  вклад в сечения вносят значения  $\epsilon$  —  $1 \sim v^{-1}$ . При этом

$$r_{\min} \sim \rho \sim \frac{Z_2}{2E} \frac{1}{v}, \quad (13)$$

т. е. траектории слабо искривляются. Дипольность выполняется опять при условии (11), а классичность — при  $E \gg \Delta E$ , что справедливо при  $v \leq 1$  (и  $Z_2 \gg 1$ ).

Таким образом, формула (8) справедлива при выполнении условия (11) и  $E \leq Z_2^2$  (последнее по условию малости влияния дифракции электронов).

Функция (9) стремится к аналитическим выражениям в пределах малых ( $v \ll 1$ ) и больших ( $v \gg 1$ ) «частот»<sup>9</sup>. Соответственно, для сечения имеем два предела:

$$(E/\Delta E)^{3/2} \gg \frac{Z_2}{2\sqrt{2\Delta E}} \quad (v \ll 1), \quad (14)$$

$$Q_{0n} \approx \frac{4\pi f_{0n}}{(2l_0+1)\Delta E} \frac{1}{v_e^2} \ln \left( \frac{4E}{\Delta E} \frac{\sqrt{2E}}{\gamma Z_2} \right), \quad (15)$$

где  $\gamma = e^C = 1,781$  ( $C$  — постоянная Эйлера),

$$\left( \frac{E}{\Delta E} \right)^{3/2} \ll \frac{Z_2}{2\sqrt{2\Delta E}} \quad (v \gg 1), \quad (16)$$

$$Q_{0n} \approx \frac{4\pi^2 f_{0n}}{\sqrt{3} (2l_0+1) \Delta E} \frac{1}{v_e^2}. \quad (17)$$

Отметим, что формула (8) может быть получена из квантового результата Гайлитиса<sup>8</sup> в квазиклассическом пределе для гипергеометрической функции; при этом формула (17) соответствует квазиклассическому пределу Крамерса в тормозном излучении<sup>11</sup>. Асимптотика сечения при больших энергиях (15) не переходит в известный результат приближения Бете — Борна, не совпадает выражение под логарифмом. Причина этого, как уже говорилось, в дифракции — в квантовости рассеяния электронов на очень малые углы. Полученная формула (8) в борновском пределе энергий столкновений  $E \gg Z_2^2$  неприменима. Сечения переходов с малой энергией возбуждения в борновском пределе вычислялись в работах<sup>12, 90</sup>.

### в) Резонансное возбуждение

Исследуемые эффективные сечения взаимодействия электронов с положительными ионами отличаются богатством резонансов. В очень узких областях энергий налетающего электрона величины сечений имеют резкие скачки, обусловленные наличием автоионизационных состояний системы налетающий электрон + ион. Налетающий электрон может возбудить

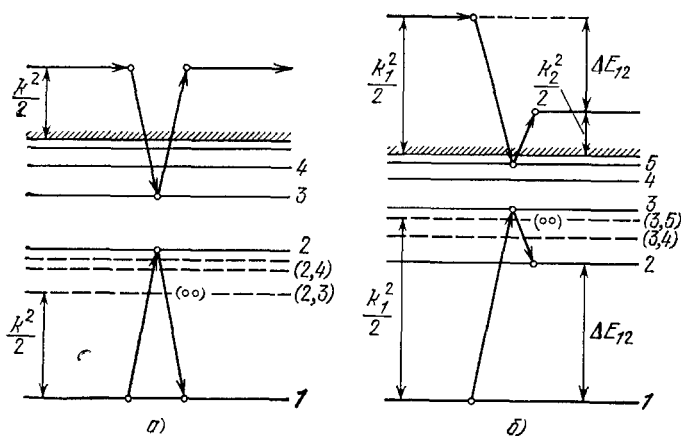


Рис. 1. Энергетическая схема переходов электронов при рассеянии через промежуточные автоионизационные состояния в упругом (а) и неупругом (б) каналах.

--- — полные энергии промежуточных автоионизационных состояний конфигураций  $(n, n')$ .

какой-нибудь уровень иона и перейти при этом на связанную орбиту этого же иона. Таким путем образуется система с двумя возбужденными электронами, которая неустойчива, подвержена автоионизации, т. е. возвращению в исходное состояние в результате обратного обмена энергией между электронами (рис. 1, а). Образование промежуточного автоионизационного комплекса и является причиной резонансов в упругом рассеянии электронов на положительных ионах<sup>13</sup>. Электрон иона, находившийся до столкновения в основном состоянии, при образовании автоионизационного комплекса может возбудиться не на первый, а на более высокий возбужденный уровень (рис. 1, б). При обратном распаде такого состояния этот электрон может перейти на более низкое возбужденное состояние. В результате произойдет возбуждение иона. Именно таков механизм образования резонансов при неупругом рассеянии<sup>3, 14</sup>. Поскольку налетающий электрон может «сесть» на высоковозбужденный уровень иона, то рассматриваемые резонансы в сечениях располагаются группами в виде кулоновских сгущений в области энергий перед открытием следующего неупругого канала. Именно множественность этих

резонансов и может приводить к их заметному вкладу в среднее сечение, тогда как ширина каждого отдельного резонанса мала.

При рассеянии электронов на нейтральных атомах также возможны аналогичные резонансы, но их число ограничено, так как число автоионизационных состояний, соответствующих конфигурации отрицательного иона, ограничено.

Резонансная структура сечений, как и потенциальная часть, может быть рассмотрена, вообще говоря, с помощью теории возмущений (во втором порядке с учетом ширин и сдвигов состояний, возникающих в результате суммирования всего ряда теории возмущений по  $1/Z_2$ ), аналогично тому, как это делается в теории резонансной флуоресценции<sup>15</sup>.

Проанализируем роль резонансного возбуждения на примере одиночного автоионизационного состояния, когда его ширина много меньше энергетического интервала между соседними автоионизационными состояниями. В этом случае теория возмущений приводит к такому же выражению для сечения резонансного рассеяния  $Q_{\text{рез}}$ , что и теория Брейта-Вигнера<sup>4</sup>:

$$Q_{\text{рез}} = \frac{2l+1}{2} \frac{\pi_i^2}{E} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{(E-E_0)^2 + (\Gamma^2/4)}; \quad (18)$$

здесь  $l$  — резонирующий момент налетающего электрона;  $E_0$  — энергия автоионизационного состояния;  $E$  — энергия налетающего электрона;  $\Gamma$  — полная ширина автоионизационного состояния;  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  — ширины во входном и выходном каналах соответственно. Формула (18) представляет резонансное сечение для перехода иона из состояния 1 в 2.

Поскольку энергия налетающего электрона  $E \sim Z_2^2$ , то из формулы (18) видно, что резонансное сечение убывает с ростом  $Z_2$  медленнее потенциального: резонансное сечение  $\sim Z_2^{-2}$ ; в резонансе сечение возрастает от значения  $\sim Z_2^{-4}$  до значения  $\sim Z_2^{-2}$ . Площадь под резонансным пиком  $Q_{\text{рез}}(E - E_0)$  тоже  $\sim Z_2^{-2}$ . Тем не менее, вклад резонансного рассеяния в полную скорость возбуждения  $K = \langle vQ \rangle$  того же порядка по  $Z_2$ , что и вклад потенциального рассеяния. Скобки  $\langle \dots \rangle$  означают усреднение по функции распределений электронов плазмы по скоростям

$$K = \int Qv \frac{df}{dE} dE \quad (19)$$

( $v$  — скорость электронов).

Интегрирование в (19) с максвелловской функцией распределения приводит к следующему вкладу резонансного сечения (18) в скорость возбуждения:

$$K_{\text{рез}} = \pi \sqrt{2\pi} (2l+1) \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma T^{3/2}} e^{-E_0/T}, \quad (20)$$

где  $T$  — температура электронов. При  $T \sim Z_2^2$  получаем

$$K_{\text{рез}} \sim \frac{1}{Z_2^3} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma} e^{-E_0/T}. \quad (21)$$

В это выражение, помимо  $Z_2^{-3}$ , входят малые ширины (при  $\Gamma_1 \sim \Gamma_2 \sim \Gamma \ll 1$ ). Поэтому  $K_{\text{рез}}$  в  $\Gamma \ll 1$  раз меньше  $K_{\text{пот}}$ . Из расчетов автоионизационных ширин следует, что  $\Gamma_{1,2} \sim 0,01$  для нижайшего возбужденного состояния и практически не зависит от  $Z_2$ . Тем не менее в целом отношение  $K_{\text{рез}}/K_{\text{пот}}$  может достигать величины  $\sim 0,1$  за счет большого числа автоионизационных уровней.

В резонансный знаменатель формулы (18) входит полная ширина для распада данного состояния по всем возможным каналам. В том числе в качестве слагаемого в  $\Gamma$  входит радиационная ширина, соответствующая



излучению фотона при переходе одного из электронов в основное или более низкое возбужденное состояние иона. При таком излучательном распаде образовавшегося автоионизационного состояния происходит связывание налетающего электрона с ионом (после того как этот электрон совершит также излучательный переход в основное состояние). Такой процесс называют диэлектронной рекомбинацией. Сечение его можно получить, если в формуле (18) под  $\Gamma_2$  подразумевать радиационную ширину. Таким образом, диэлектронная рекомбинация и резонансное возбуждение ионов являются конкурирующими процессами. Поскольку автоионизационная и радиационная ширины по-разному зависят от  $Z_2$ , то каждый из этих процессов преобладает в разных областях значений  $Z_2$ .

Автоионизационная ширина, как уже говорилось, почти не зависит от  $Z_2$  и может быть оценена для нижнего возбужденного уровня величиной  $\Gamma_{\text{авт}} \sim 0,01 a.u.$  Излучательная ширина сильно возрастает с ростом  $Z_2$ :

$$\Gamma_{\text{рад}} \approx \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{(137)^3} |d|^2; \quad (22)$$

здесь  $\omega$  — частота перехода,  $d$  — дипольный матричный элемент перехода. Видно, что  $\Gamma_{\text{рад}} \sim Z_2^4/137^3$ . Эту величину надо сравнить с постоянной автоионизационной шириной  $\sim 0,01$ . Они сравниваются при

$$|Z_0 \sim (0,01 \cdot 137^3)^{1/4} \approx 13. \quad (23)$$

При  $Z_2 < 13$  преобладает резонансное возбуждение, а при  $Z_2 > 13$   $\Gamma \sim \Gamma_{\text{рад}}$  и вклад резонансного сечения возбуждения в  $K$  пропорционален произведению трех малых величин:

$$|K_{\text{рез}} \sim Z_2^{-3} \frac{\Gamma_{\text{авт}} \Gamma_{\text{завт}}}{\Gamma_{\text{рад}}}. \quad (24)$$

Таким образом, если при  $Z_2 \leq 13$  вклад резонансов в возбуждение составляет  $\sim 10-20\%$ , то при  $Z_2 > 13$  этот вклад резко уменьшается.

#### г) Релятивистская постановка задачи

С увеличением заряда ядра  $Z$  возрастает роль релятивистских эффектов, поэтому необходимо знать их вклад в сечение возбуждения многозарядных ионов электронным ударом.

В релятивистской теории, как и в нерелятивистской, применима теория возмущений по межэлектронному взаимодействию. Полный гамильтониан в релятивистском случае имеет вид

$$H = \sum_{i=1}^2 H_i^{(0)} + H_V^{(0)} + V_{ee} + \sum_{i=1}^2 V_{Ve_i}, \quad (25)$$

где  $H_i^{(0)} = mc^2 \beta_i + c \mathbf{p}_i \boldsymbol{\alpha}_i + e^2/r_i$  — гамильтониан Дирака электрона в поле точечного заряда  $Z_2$  с бесконечной массой,  $H_V^{(0)}$  — гамильтониан свободного электромагнитного поля,  $V_{ee} = r_{12}^{-1}$ ;  $V_{Ve_i} = e \boldsymbol{\alpha}_i \mathbf{A}$  — оператор взаимодействия электрона с поперечным электромагнитным полем, описываемым векторным потенциалом  $\mathbf{A}$ ;  $\boldsymbol{\alpha}$  — тройка матрицы Дирака.

Поскольку фотоны в начальном и конечном состояниях отсутствуют, то возбуждение иона за счет взаимодействия через виртуальное поперечное электромагнитное поле описывается во втором порядке теории возмущений по  $V_{Ve}$ . Амплитуда вероятности возбуждения при этом пропорциональна

$$A_{1f} \sim \int dk \frac{\langle 1', 2' | \alpha_1 e^{ikr_1} | v \rangle \langle v | e^{-ikr_2} | 1, 2 \rangle}{E_1 - E_f - k}, \quad (26)$$

где  $E_i$ ,  $E_f$  — начальная и конечная энергии налетающего электрона;  $|1, 2\rangle$ ;  $|V\rangle$ ;  $|1', 2'\rangle$  — собственные функции гамильтониана Дирака двух невзаимодействующих электронов (при  $r_{12} \rightarrow \infty$  состояния  $|1, 2\rangle$ ,  $|1', 2'\rangle$  переходят соответственно в начальное и конечное состояния системы);  $k$  — волновой вектор промежуточного фотона. Учет тождественности электронов достигается антисимметризацией собственных функций гамильтониана  $H_1^{(0)} + H_2^{(0)}$ . Амплитуда перехода, помимо «прямого» члена, содержит «обменный».

Поскольку

$$(E_i - E_f - k)^{-1} = i\pi\delta(E_i - E_f - k) + P \frac{1}{E_i - E_f - k},$$

то главную часть интеграла (26) можно объединить с амплитудой вероятности возбуждения в первом порядке теории возмущения по кулоновскому взаимодействию  $r_{12}^{-1}$  и после ряда тождественных преобразований привести к виду

$$A_{if} = \langle 1', 2' | r_{12}^{-1} \cdot e^{i(E_i - E_f)r_{12}} (1 - \alpha_1 \alpha_2) | 1, 2 \rangle. \quad (27)$$

Именно это выражение берется в работе Уолкера<sup>18</sup> в качестве исходного. Отсюда ясно, чем в действительности пренебрег Уолкер: полюсный член в амплитуде вероятности перехода (26) описывает процесс возбуждения через промежуточную резонансную стадию тормозного испускания фотона налетающим электроном и последующим поглощением его ионом. В этом случае в промежуточном состоянии в резонансе может выполняться закон сохранения энергии и, следовательно, виртуальное состояние становится реальным. Запрещенный для свободных электронов, рассеивающихся друг на друге с передачей энергии, этот процесс становится возможным во внешнем кулоновском поле ядра.

Несмотря на существенно иную зависимость от  $Z_2$  сечения такого процесса (возрастание  $\sim Z_2^2$ ), чем зависимость сечения прямого возбуждения, ( $\sim Z_2^4$ ), пренебрежение им оправдано для реальных значений  $Z_2$ . Такой вывод позволяет сделать точный анализ во втором порядке теории возмущений.

Отметим возможность использования более изящной релятивистски-инвариантной формы теории возмущений (см., например,<sup>17</sup>), приводящей, конечно, к тем же результатам. В этой теории используется ковариантная лоренцева калибровка, в которой электромагнитное поле равным образом квантуется на продольные и поперечные фотоны, а взаимодействие электронных и фотонных полей характеризуется одной универсальной константой  $e^2/\hbar c$ .

Весьма своеобразно проявляются релятивистские эффекты при возбуждении недипольных переходов между компонентами тонкой структуры сложных многозарядных ионов. Например, излучательный переход  $3D_{5/2} \rightarrow 3D_{3/2}$  калиеподобного иона  $\text{Mo}^{23+}$  является переходом M1 — магнитным дипольным переходом. При возбуждении же этого перехода ударом заряженной частицы главным может быть и электрическое квадрупольное (E2) взаимодействие. Сечение магнитного дипольного возбуждения имеет порядок малости  $(Ze^2/\hbar c)^2 (v/c)^2$  по отношению к дипольному электрическому, так как амплитуда магнитного поля, движущегося со скоростью  $v$  заряда, в  $v/c$  раз меньше амплитуды электрического поля. Сечение же квадрупольного электрического возбуждения имеет порядок  $(E/Z^2)^2$  по отношению к электрическому дипольному. Поэтому при условии  $E \gg Z^6/M$  (137)<sup>4</sup> (где  $M$  — масса налетающей частицы) магнитное воз-

буждение меньше электрического квадрупольного. Для протонов это условие с запасом выполняется в условиях высокотемпературной плазмы ( $T \sim 10$  кэВ). Для возбуждения электронным ударом главным может оказаться либо E2, либо M1 в соответствии с написанным выше условием.

## 2. ВОЗБУЖДЕНИЕ И ИОНИЗАЦИЯ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ ИОНОВ ЭЛЕКТРОНАМИ

Водородоподобные ионы — простейший из рассматриваемых случаев. Волновые функции сплошного спектра, на больших расстояниях от иона переходящие в плоские волны с определенным направлением распространения, т. е. с заданным вектором  $k$ <sup>4</sup>, равны:

$$\psi_k = e^{\pi Z_2/2k} \Gamma \left( 1 - \frac{iZ_2}{2k} \right) e^{ikr} F \left( \frac{iZ_2}{k}; 1; i(kr - \mathbf{k}\mathbf{r}) \right). \quad (28)$$

Полное и дифференциальное сечения рассеяния равны

$$Q_{0n} = 2\pi \int Q_{0n}(\theta) \sin \theta d\theta, \quad (29)$$

$$Q_{0n}(\theta) = \frac{k_n}{k_0} \left[ \frac{1}{4} |f(\theta) + g(\theta)|^2 + \frac{3}{4} |f(\theta) - g(\theta)|^2 \right]; \quad (30)$$

здесь  $k_0$ ,  $k_n$  — начальный и конечный импульсы налетающего электрона. Прямая  $f(\theta)$  и обменная  $g(\theta)$  амплитуды рассеяния равны

$$f(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int \psi_n^*(\mathbf{r}_2) \psi_0(\mathbf{r}_2) \psi_{k_0}(\mathbf{r}_1) \psi_{k_n}^*(\mathbf{r}_1) \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{r_{12}}, \quad (31)$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int \psi_n^*(\mathbf{r}_1) \psi_0(\mathbf{r}_2) \psi_{k_0}(\mathbf{r}_1) \psi_{k_n}^*(\mathbf{r}_2) \frac{d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2}{r_{12}}. \quad (32)$$

Из (28), (30) следует, что в пороге при  $k_n = 0$  сечение реакции возбуждения  $0 \rightarrow n$  конечно. Видно также, что сечение обратного процесса девозбуждения очень медленными электронами с импульсом  $k_n \rightarrow 0$  расходится пропорционально  $k_n^{-2}$ . Этот вывод следует также и из принципа детального равновесия:

$$k_0^2 Q_{0n} = k_n^2 Q_{n0}. \quad (33)$$

Расходимость сечения девозбуждения медленными электронами объясняется притяжением кулоновского поля иона, которое эффективно увеличивает поток электронов в зоне реакции.

Отмеченные свойства конечности сечений возбуждения и расходимость сечения девозбуждения объясняются только наличием кулоновского поля притяжения и потому имеют место при рассеянии электрона на положительных ионах с любым числом связанных электронов.

Из свойств волновых функций и амплитуд рассеяния следует, что сечение  $Q_{0n}$  возбуждения перехода  $0 \rightarrow n$  можно представить в виде

$$Q_{0n} = Z_2^{-4} \varphi_{0n}(x); \quad x = \frac{E}{\Delta E}, \quad (34)$$

где  $\varphi_{0n}$  не зависит от  $Z_2$ , а определяется только данным переходом для данного изоэлектронного ряда ионов. Пропорциональность  $Q_{0n} \sim Z_2^{-4}$  справедлива только для переходов с энергией возбуждения  $\sim Z_2^2$ .

### а) Возбуждение водородоподобных ионов

Метод КБО для возбуждения водородоподобных ионов применялся в работах<sup>2, 18-20</sup>; в работах<sup>21-24</sup> использовался метод КБ, причем авторы работ<sup>20, 21</sup> для S  $\rightarrow$  S-переходов обошлись без разложения по моментам. В работах<sup>25, 26</sup> использовался метод возмущенных волн с поляризован-

ными орбиталями, а в работе <sup>27</sup> — сложный комбинированный метод, опробованный на экспериментально изученных случаях возбуждения атомов Н и Не <sup>28</sup>. Все эти методы расчета должны давать одинаковые результаты ввиду справедливости теории возмущений.

На рис. 2, 3 представлены приведенные (или сканированные) сечения  $Z^4Q$  для возбуждения из основного в  $p$ -состояния:  $1s \rightarrow n$ ,  $l = 1$ . Согласно формуле (34) такое произведение должно быть универсальной

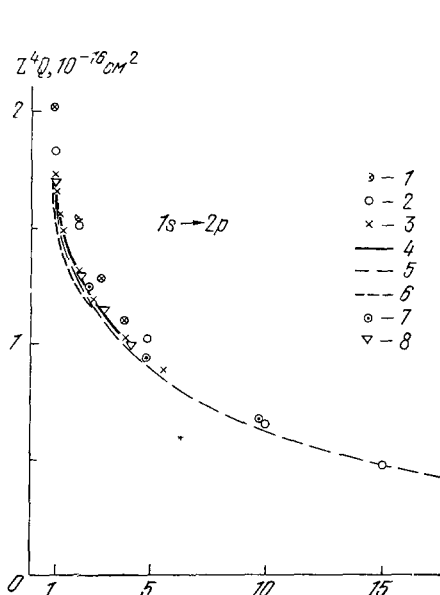


Рис. 2. Приведенное сечение  $Z^4Q$  ( $1s \rightarrow 2p$ ) (нерелятивистское) возбуждения перехода  $1s \rightarrow 2p$  водородоподобных ионов электронов ударом как функция отношения кинетической энергии электрона к передаваемой энергии  $x = E/\Delta E$ .

Расчеты без учета обмена: 1 — КБ<sup>18,23</sup>; 2 — 2. Расчеты с учетом обмена: 3 — КБО<sup>18</sup>; метод возмущенных волн с поляризованными орбиталями: 4 —  $Z = 26$ <sup>25</sup>, 5 —  $Z = 10$ , 6 —  $Z = 6$ <sup>26</sup>, 7 — <sup>27</sup>; 8 — метод сильной связи  $1s, 2s, 2p$ ,  $Z = 6$  и  $10$ <sup>28</sup>.

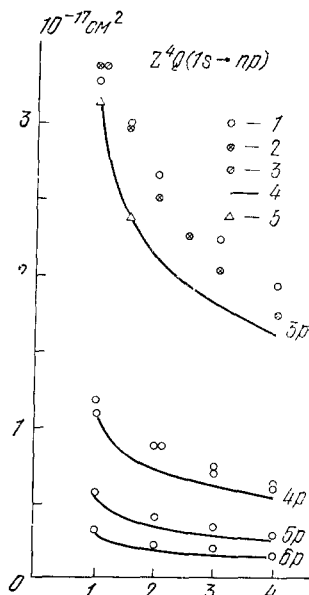


Рис. 3. Приведенное сечение  $Z^4Q$  ( $1s \rightarrow np$ ) (нерелятивистское) возбуждения переходов  $1s \rightarrow np$  водородоподобных ионов электронов ударом.

Расчеты без учета обмена (метод КБ): 1 — 2; 2 — 23; 3 — 24. Расчеты с учетом обмена: 4 — метод возмущенных волн с поляризованными орбиталями,  $Z = 26$ <sup>25</sup>; 5 — КБО<sup>18</sup>.

функцией для рассматриваемого изoeлектронного ряда, зависящей от приведенной энергии  $x$  налетающего электрона и от конкретного перехода  $0 \rightarrow n$ . Видно, что функции  $Z^4Q_{0n}$  действительно не зависят от  $Z_2$  при больших  $Z_2$ .

Из рис. 2, 3 видно, что учет обмена налетающего и связанного электронов слабо влияет на результат для возбуждения водородоподобных ионов. Это объясняется близостью значений прямой и обменной амплитуд.

Рассмотрим поведение сечений при  $n \rightarrow \infty$ , т. е. при увеличении главного квантового числа возбуждаемого состояния. Для этого удобно выразить сечение через так называемую силу столкновения  $\Omega$ <sup>18</sup>:

$$Z^4Q(1s \rightarrow n1) = \frac{\pi}{n^3 - n} \frac{\tilde{\Omega}(x)}{x}, \quad (35)$$

где приведенная сила столкновения  $\tilde{\Omega}$  связана с  $\Omega$  посредством

$$\tilde{\Omega} = n^3 Z^2 \Omega. \quad (36)$$

Функция  $\tilde{\Omega}$  обладает тем свойством, что при  $Z_2 \rightarrow \infty$  и  $n \rightarrow \infty$  она стремится к постоянному пределу — некоторой универсальной функции от  $x$ . В табл. I приведен предел функции  $\tilde{\Omega}$  при  $n, Z \rightarrow \infty$ , вычисленный Талли<sup>23</sup> в приближении КБ без обмена. Эта таблица с помощью формулы (35) позволяет вычислить сечения при любых  $Z_2 \geq 4$  и  $n \geq 4$ . Сравнивая

Таблица I

Предел при  $n, Z \rightarrow \infty$  приведенной силы столкновения  $\tilde{\Omega}_{1s \rightarrow nl}$  (см. (55)), зависящий от энергии налетающего электрона, в пороговых единицах  $x = E/\Delta E^{23}$

$l$	$x = 1$	$x = 2$	$x = 3$	$x = 4$
0	1,843	1,883	1,878	1,869
1	6,94	10,14	12,27	13,8
2	0,835	1,342	1,59	1,74

результат такого вычисления с сечениями возбуждения уровня  $n = 4$ , представленными на рис. 3, видим, что ошибка от использования предельной силы столкновения  $\tilde{\Omega}(x)|_{n, Z \rightarrow \infty}$  составляет 15% для  $n = 4$ . С ростом  $n$  эта ошибка уменьшается.

Хейес и Ситон<sup>29</sup> вычислили приведенные силы столкновений  $Z_2^2 \Omega$  для возбуждения уровней 2s и 2p ионов  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{2+}$ ,  $\text{C}^{5+}$ ,  $\text{Ne}^{9+}$ . Вычисления проводились методами возмущенных волн и сильной связи (1s, 2s, 2p) с учетом обмена. Было найдено, что уже для  $\text{C}^{5+}$  результаты, полученные обоими методами, близки друг к другу. Это совпадение является следствием применимости теории возмущений: оба метода по-разному учитывают лишь часть следующего приближения. По этой причине нельзя отдать предпочтение ни одному из этих методов. Однако с уверенностью можно сказать, что уже для иона  $\text{C}^{5+}$  теория возмущений, — метод КБО, дает надежные результаты.

Отметим, что абсолютные значения  $Z_2^2 \Omega$ , полученные в<sup>29</sup>, на 5—10% меньше этих величин, полученных в<sup>18, 25</sup>.

Для расчета сечений возбуждения переходов между компонентами тонкой структуры можно пользоваться формулами (8), (15), (17). Тонкое расщепление уровней  $2P_{3/2} \rightarrow 2S_{1/2}$ ,  $2P_{1/2}$  сильно возрастает с ростом  $Z$ <sup>30</sup>, поэтому также сильно возрастают электрические поля, приводящие к перемешиванию  $2s \rightleftharpoons 2p$ . Били<sup>31</sup> были вычислены методом КБ сечения переходов  $2s \rightarrow 3p$ ,  $7p$ ,  $Z \rightarrow \infty$ .

Хейес и Ситон<sup>32</sup> исследовали вклад резонансов в возбуждение уровней 2s, 2p ионов  $\text{C}^{5+}$  и  $\text{Ne}^{9+}$  из основного состояния методом сильной связи с учетом состояний иона 1s, 2s, 2p и автоионизационных состояний  $3s^2$ ,  $3p^2$ ,  $3d^2$ . На рис. 4 показаны вычисленные этими авторами силы переходов  $Z^2 \Omega$ . Видно, что резонансы хорошо отделены друг от друга. Рис. 4 позволяет грубо оценить среднюю ширину резонансов для  $\text{C}^{5+}$  величиной 0,2 эВ, что близко к величинам, обычно получаемым в расчетах ширины автоионизационных состояний. Авторы работы<sup>32</sup> оценивают вклад резонансов в скорость возбуждения  $K$  величиной  $\sim 20\%$  для переходов  $1s \rightarrow 2s$  и  $10\%$  для перехода  $1s \rightarrow 2p$ . Более высокие автоионизационные состояния  $nl, n'l'$  с  $n, n' > 3$  вносят еще меньший вклад, так как  $\Gamma_{\text{авт}}$  сильно уменьшается с ростом  $n$ .

На рис. 5 приведены результаты расчетов Уолкера<sup>18</sup> переходов  $1s \rightarrow 2S_{1/2}$ ,  $2P_{1/2}$ ,  $2P_{3/2}$  методом КБО в релятивистском приближении —

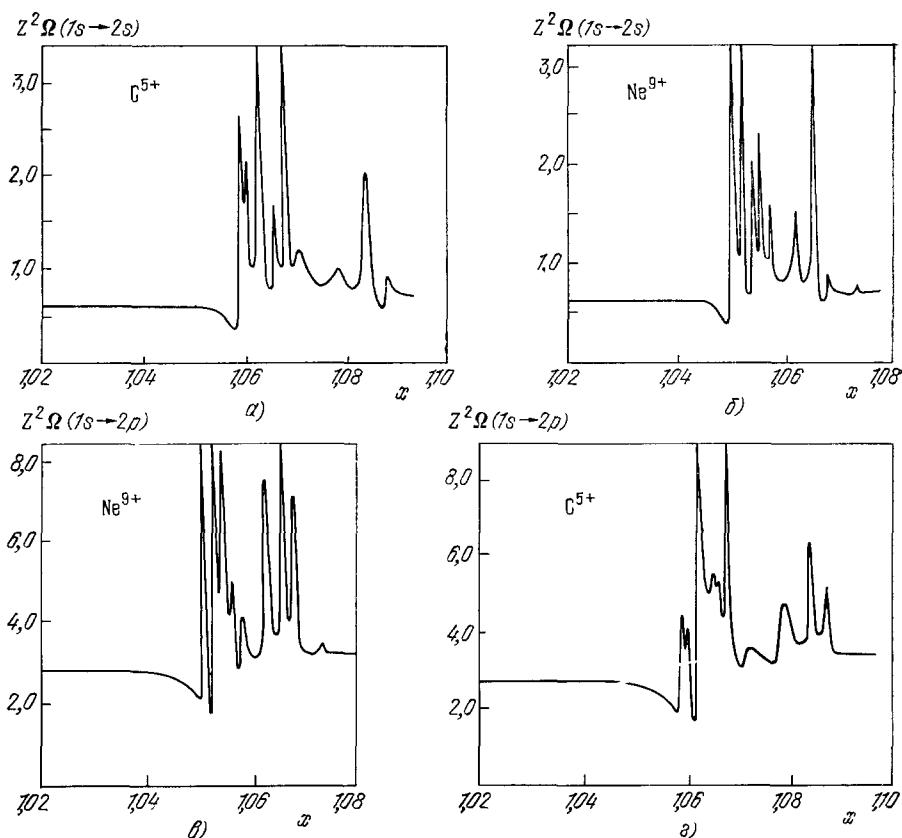


Рис. 4. Резонансная структура в приведенной силе столкновения  $Z^2\Omega$  электрона с ионами  $C^{5+}$  и  $Ne^{9+}$  для переходов  $1s \rightarrow 2s$  и  $1s \rightarrow 2p$ .

Расчет по методу сильной связи состояний  $1s, 2s, 2p$  с автоионизационными состояниями  $3s^2, 3p^2, 3d^2$ .

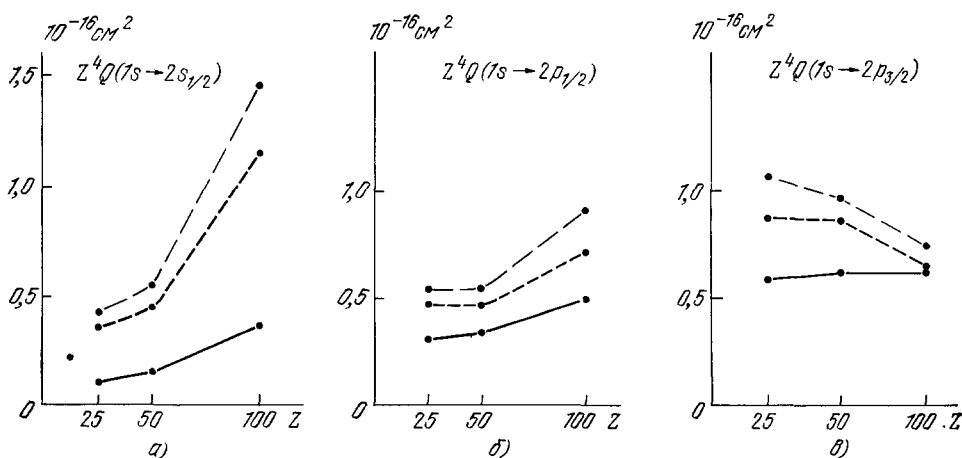


Рис. 5. Приведенные сечения  $Z^4Q$  возбуждения переходов  $1s \rightarrow 2s_{1/2}$  и  $1s \rightarrow 2p_{1/2, 3/2}$  водородоподобных ионов электронами в зависимости от  $Z$  (с учетом обмена), вычисленные Уокером<sup>16</sup> в релятивистском приближении по формуле (37) для трех значений относительной энергии  $x = E/\Delta E$ : 1,07 (---), 1,33 (—) и 5,33 (—).

по формуле (27). Из рисунка видно, что наиболее сильно меняется с ростом  $Z$  — вследствие релятивистских эффектов — сечение при меньших энергиях налетающего электрона, в частности, вблизи порога, т. е. при  $x = 1$ . (В нерелятивистском приближении каждая кривая на рис. 5 должна перейти в прямую линию, параллельную оси абсцисс.) С ростом этой энергии влияние релятивистских эффектов уменьшается. Видно также, что учет релятивизма меняет сечения при  $Z = 25$  всего на 5—7%, при  $Z = 50$  не более 20—30%, а при  $Z = 100$  — в два с лишним раза. Энергия связи электрона в состоянии  $1s$  при  $Z = 50$  равна  $\sim 37$  кэВ. На основании результатов Уокера<sup>16</sup> можно сделать, таким образом, вывод, что релятивистские эффекты начинают быть заметными для возбуждения электронов с энергией связи  $\gtrsim 40$  кэВ.

### б) Ионизация водородоподобных ионов

Для вычисления сечений ионизации по теории возмущений необходимо в формулах (29) — (32) заменить функцию конечного состояния связанного электрона волновой функцией непрерывного спектра с расходящейся волной на бесконечности. Так же, как и для возбуждения, первое приближение теории возмущений приводит для сечения ионизации к выражению, аналогичному (34), т. е. сечение ионизации падает с ростом заряда ядра  $\sim Z^{-4}$  и характеризуется универсальной для всего

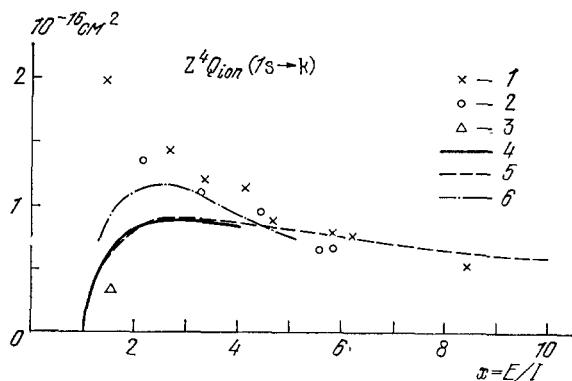


Рис. 6. Приведенное сечение ионизации  $Z^4 Q_{ion}(1s \rightarrow k)$  водородоподобных ионов электронами.

Эксперимент<sup>38</sup>: 1 —  $Ne^{9+} \rightarrow Ne^{10+}$ ; 2 —  $O^{7+} \rightarrow O^8$ ; 3 —  $Ar^{17+} \rightarrow Ar^{18+}$ ; теория: 4 — расчет по методу КБО<sup>33 34</sup>; 5 — аналитическая аппроксимация этих результатов формулой (60); 6 — классический расчет Сэлопа<sup>35</sup>.

изоэлектронного ряда зависимостью от энергии в пороговых единицах  $x = E/I$  ( $I$  — потенциал ионизации иона). Отличительной чертой этой зависимости является обращение сечения ионизации в нуль на пороге. Это объясняется стремлением к нулю при  $E \rightarrow I$  интервала энергии, на котором отличен от нуля спектр выбитых электронов.

Нерелятивистским методом КБО сечение ионизации водородоподобных ионов вычислено в работах<sup>33</sup> (H, He и  $Z = 128$ ) и<sup>34</sup> ( $Z = \infty$ ). Сэлопом<sup>35</sup> были вычислены сечения ионизации многих многозарядных ионов, в том числе водородоподобных ионов  $C^{5+}$ ,  $N^{6+}$ ,  $O^{7+}$ ,  $Ne^{9+}$  методом парных столкновений между электронами, т. е. модифицированным методом Гризинского, использующим представления классической механики.

Экспериментально ионизация исследовалась также для многих многозарядных ионов<sup>36-38</sup>, в том числе водородоподобных ионов  $N^{6+}$ ,  $O^{7+}$ ,

$\text{Ag}^{17+}$  <sup>35</sup>. Техника измерений, аналогичная технике этих работ, использовалась в работах <sup>39, 40</sup>.

На рис. 6 приведено сравнение теоретических и экспериментальных значений приведенного сечения  $Z^4 Q_{\text{ion}}$  для ряда элементов. Видно, что эксперимент и теория в общем неплохо согласуются друг с другом, за исключением двух точек. Некоторые экспериментальные точки вблизи порога на  $\sim 50\%$  выше теоретических. Следует отметить, что получение экспериментальных сечений из наблюдаемых величин требует решения системы большого числа связанных алгебраических уравнений. Результаты расчетов по классической механике <sup>35</sup> ближе к экспериментальным точкам. Однако точность такого расчета неопределенна. Опыт расчетов сечений ионизации нейтральных атомов показывает, что их точность порядка множителя 2 (т. е.  $\sim 200\%$ ).

#### в) Скорости возбуждения и ионизации водородоподобных ионов

Для расчетов интенсивностей излучения из плазмы необходимо знать скорости возбуждения ионов, т. е. величины  $K = \langle \nu Q \rangle$  ( $\nu$  — скорость электронов), усредненные по функции распределения электронов по скоростям (см. (19)). Будем использовать максвелловскую функцию распределения с температурой  $T$ .

Используя сечения из работ <sup>18-28, 31</sup> и вычисляя интеграл (19), получим скорости возбуждения водородоподобных ионов:

$$K(1s \rightarrow 2p) = \frac{3,5}{Z^3} \alpha^{1/2} e^{-\alpha} [-0,12 + (2,74 + 1,84\alpha) e^{\alpha} I(\alpha)], \quad (37)$$

$$K(1s \rightarrow 2s) = \frac{1,5}{Z^3} \alpha^{1/2} e^{-\alpha} [1 + 0,058 e^{\alpha} I(\alpha)], \quad (38)$$

$$K(1s \rightarrow 3s) = \frac{0,32}{Z^3} \alpha^{1/2} e^{-\alpha}. \quad (39)$$

$$K(1s \rightarrow 3p) = \frac{\alpha^{1/2}}{Z^3} e^{-\alpha} [-0,52 + (1,83 + 1,70\alpha) e^{\alpha} I(\alpha)], \quad (40)$$

$$\left. \begin{aligned} K(1s \rightarrow ns) &= \frac{6,54}{Z^3 n^3} \alpha^{1/2} e^{-\alpha}, \\ K(1s \rightarrow np) &= \frac{\alpha^{1/2} e^{-\alpha}}{Z^3 n^3} [24,6 + 17,2 e^{\alpha} I(\alpha)], \\ K(1s \rightarrow nd) &= \frac{\alpha^{1/2} e^{-\alpha}}{Z^3 n^3} [2,98 + 2,41 e^{\alpha} I(\alpha)], \end{aligned} \right\} \quad (41)$$

$$\alpha = \frac{\Delta E}{T}, \quad 0,05 \leq \alpha \leq \infty.$$

Функция  $I(\alpha)$  связана с интегральной показательной функцией <sup>41</sup>, и для ее вычисления можно использовать аппроксимацию

$$I(\alpha) = \int_0^{\infty} \frac{e^{-\alpha x}}{x} dx = \begin{cases} \ln\left(\frac{0,562}{\alpha}\right) + \alpha - \frac{\alpha^2}{4} + \frac{\alpha^3}{18} - \frac{\alpha^4}{96}, & \alpha \leq 1, \\ \frac{e^{-\alpha}}{\alpha} - 1,29 e^{-2,16\alpha}, & \alpha \geq 1. \end{cases} \quad (42)$$

Скорость ионизации водородоподобного иона из состояния с главным квантовым числом  $n$  аппроксимировалась в работе <sup>33</sup> выражением

$$K_{\text{ion}}(n, z) = 10^{-8} \text{ см}^3/\text{с} \left( \frac{2n^2}{Z^2} \right)^{3/2} e^{-\alpha} \sum_{m=0}^5 \kappa_m \alpha^m, \quad \alpha = \frac{I_n}{T}. \quad (43)$$



Здесь  $I_n$  — потенциал ионизации  $n$ -го состояния, а подгоночные коэффициенты  $\kappa_m$  равны

	$\kappa_0$	$\kappa_1$	$\kappa_2$	$\kappa_3$	$\kappa_4$	$\kappa_5$
1s:	4,013	-0,2186	-0,3474	0,1338	-0,01769	$7,767 \cdot 10^{-4}$
2s:	3,275	0,8003	-0,8262	0,2439	0,02943	$1,238 \cdot 10^{-3}$

Скорость возбуждения (или девозбуждения) в тех случаях, когда сечение определяется в дипольном приближении формулами (8), (15), (17), равна

$$K_{\text{дип}}(\alpha) = \frac{6 \sqrt{2\pi} f_{0n}}{(2l_0+1) \Delta E^{3/2}} \sqrt{\alpha} \left[ \frac{2}{3} \alpha^{-\alpha} \ln \left( \frac{4 \sqrt{2\Delta E}}{\gamma Z} \right) + I(\alpha) \right], \quad (44)$$

$$\alpha^{-3/2} \gg Z/2 \sqrt{2\Delta E}, \quad \gamma = 1,781 \dots,$$

$$K_{\text{дип}}(\alpha) = \frac{3 \sqrt{6\pi} f_{0n}}{(2l_0+1) \Delta E^{3/2}} \sqrt{\alpha} e^{-\alpha}, \quad (45)$$

$$\alpha^{-3/2} \ll Z/2 \sqrt{2\Delta E}.$$

Напомним, что атомной единицей скорости реакции является  $K_0 = a_0^2 v_0 = 6,12 \cdot 10^{-9} \text{ см}^3/\text{с}$ , где  $a_0$  — боровский радиус,  $v_0 = 2,188 \cdot 10^8 \text{ см/с}$  — атомная единица скорости.

### 3. ЭНЕРГИИ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ СЛОЖНЫХ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

Одна из трудностей для теории при переходе к гелиеподобным и более сложным ионам состоит в вычислении энергий возбужденных и основных состояний. Для ионов с двумя и более электронами нет строгих аналитических формул для этих энергий, они получаются вариационным методом или, по теории возмущений, при разложении по малому параметру  $1/Z$ .

В работе Ивановой и Сафроновой<sup>42</sup> в нерелятивистском приближении с использованием полевой формы теории возмущений были вычислены энергии основных и некоторых возбужденных состояний ионов с электронными конфигурациями  $1s^2 2s^{n_1} 2p^{n_2}$  ( $n_1 = 0 - 2$ ,  $n_2 = 0 - 6$ ). Эти энергии записываются в виде ряда по  $1/Z$ :  $E = E_0 Z^2 + E_1 Z + E_2 + \dots$ .

Энергии возбужденных состояний ряда {He} вычислены в работах<sup>43, 44</sup>. Блэнчардом<sup>43</sup> было обработано большое число вариационных расчетов (основанием служили работы<sup>45</sup>) и расчетов по теории возмущений. Он представил полную энергию двух электронов в виде ряда по степеням  $Z^{-1}$  ( $E_0 = -0,5 (1 + n^{-2})$ ) и определил 5—8 первых коэффициентов  $E_k$  из сравнения этого ряда с результатами оригинальных расчетов. Работа<sup>43</sup> дает нерелятивистские значения энергий состояний  $n^1, {}^3\text{S}$  и  $n^1, {}^3\text{P}$  ( $n = 2 \div 5$ ). В работе<sup>44</sup> энергии уровней  $1s^2$ ,  $2^1, {}^3\text{P}$  и  $2^1, {}^3\text{S}$  были вычислены по теории возмущений с учетом релятивистских эффектов. Приводятся численные результаты для  $Z = 10, 20, 30, \dots, 100$ .

Сравнение теоретических<sup>43, 45</sup> и экспериментальных<sup>46</sup> значений потенциалов ионизации и энергий возбуждения для некоторых состояний гелиеподобных ионов демонстрирует прекрасное согласие расчетных и экспериментальных данных. С ростом  $Z$  расхождение теории и эксперимента (в четвертом, пятом знаках) увеличивается из-за неучтенных в теории релятивистских эффектов.

Помимо проведения релятивистских расчетов, можно произвести экстраполяцию имеющихся экспериментальных значений энергий при  $Z \leq 10$  в область больших  $Z$ . Такая операция была осуществлена Лотцем<sup>47</sup> для ионов нескольких изoeлектронных рядов ( $1 \leq Z \leq 30$ ) путем

сравнения разложения искомых энергий по степеням  $Z^{-1}$  с их экспериментальными значениями. Результаты Лотца <sup>47</sup> весьма точно воспроизводят экспериментальное значение потенциала ионизации <sup>48</sup> для  $\text{Fe}^{24+}$ .

Результаты расчетов избранных уровней литиеподобных <sup>49, 50</sup> и бериллиевоподобных <sup>51</sup> ионов хорошо согласуются с результатами Ивановой и Сафроновой <sup>42</sup>.

На основе вышесказанного можно сделать вывод о том, что очень много уровней большого числа многозарядных ионов можно определить тем или иным способом — на основе теоретических расчетов или экстраполяцией спектроскопических данных <sup>46</sup> с точностью, достаточной для расчетов сечений различных процессов.

#### 4. ВОЗБУЖДЕНИЕ ДИПОЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ С МАЛОЙ ЭНЕРГИЕЙ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Сравним величины сечений, даваемые формулой (8), с сечениями, вычисленными более сложными машинными методами.

Функция  $F(v)$  хорошо изучена в теории электромагнитного возбуждения ядер положительными ионами <sup>52</sup> и в теории тормозного излучения классической частицы в кулоновском поле. Она была затабулирована в <sup>52</sup> в области  $0,1 \leq v \leq 4$ , а в более широкой области  $0,01 \leq v \leq 20$  в диссертации Гервидса <sup>53</sup>.

Функцию  $F(v)$  можно аппроксимировать следующей зависимостью:

$$F(v) \approx \begin{cases} \frac{4}{\pi^2} \ln \frac{1,123}{v} + 1,46v^{0,7}, & v \leq 0,2, \\ \frac{4}{\pi \sqrt{3}} + \frac{0,163}{\sqrt{v}}, & v \geq 0,2. \end{cases} \quad (46)$$

##### а) Литиевоподобные ионы $\{\text{Li}\}$ , переход $2s \rightarrow 2p$

Сечение этого перехода было вычислено для нескольких ионов в целом ряде работ: методом Кулон — Борна (КБ) для ионов  $\text{Be}^+$ ,  $\text{N}^{4+}$ ,  $\text{Ne}^{7+}$  <sup>54</sup>; тем же методом для  $\text{N}^{4+}$  в работе <sup>55</sup>; методом КБ и сильной связи для  $\text{Be}^+$  <sup>56</sup>; методом сильной связи с учетом пяти ближайших к основному состояний для  $\text{N}^{4+}$  <sup>57</sup> и ионов  $\text{C}^{3+}$ ,  $\text{Ar}^{15+}$  <sup>58</sup>. В работе <sup>59</sup> методом сильной связи исследовались резонансы при возбуждении этого перехода электронами с энергией  $1,4\text{Ry} \leq E \leq 2,6\text{Ry}$ . Было обнаружено большое число узких резонансов (рис. 7), однако их вклад в усредненное сечение оказался невелик ( $\sim 5\%$ ).

Экспериментально сечение указанного перехода измерялось только для ионов  $\text{C}^{3+}$  <sup>60</sup> (в области энергий 8—500 эВ) и  $\text{N}^{4+}$  <sup>61</sup> (в области энергий 130—305 эВ).

На рис. 8 сравниваются сечения возбуждения этого перехода у различных ионов, определяемые формулой (8), с полученными численными методами. Для вычисления сечения по формуле (8) мы использовали силы осцилляторов  $2s \rightarrow 2p$  перехода литиеподобных ионов, собранные в работе <sup>62</sup>. Эти данные можно аппроксимировать зависимостью

$$f_{2s \rightarrow 2p}^s \{\text{Li}\} = \frac{1,35}{Z} + \frac{2,20}{Z^2}, \quad (47)$$

которая хорошо подтверждается более поздними измерениями <sup>63</sup> для литиевоподобных ионов серы.

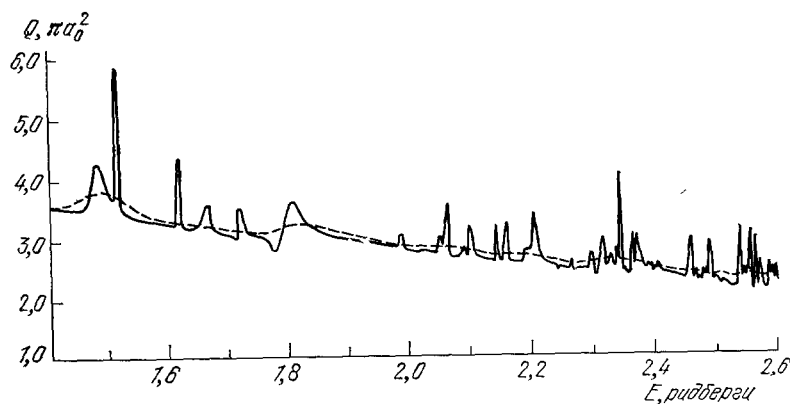


Рис. 7. Сечение возбуждения электронами перехода  $2s \rightarrow 2p$  у иона  $C^{3+}$  (порог  $8 \text{ эВ} = 0,59 \text{ Ry}$ ), вычисленное методом сильной связи<sup>59</sup> с включением автоионизационных состояний  $C^{2+}$ .

Штриховая линия — усредненное по резонансам сечение.

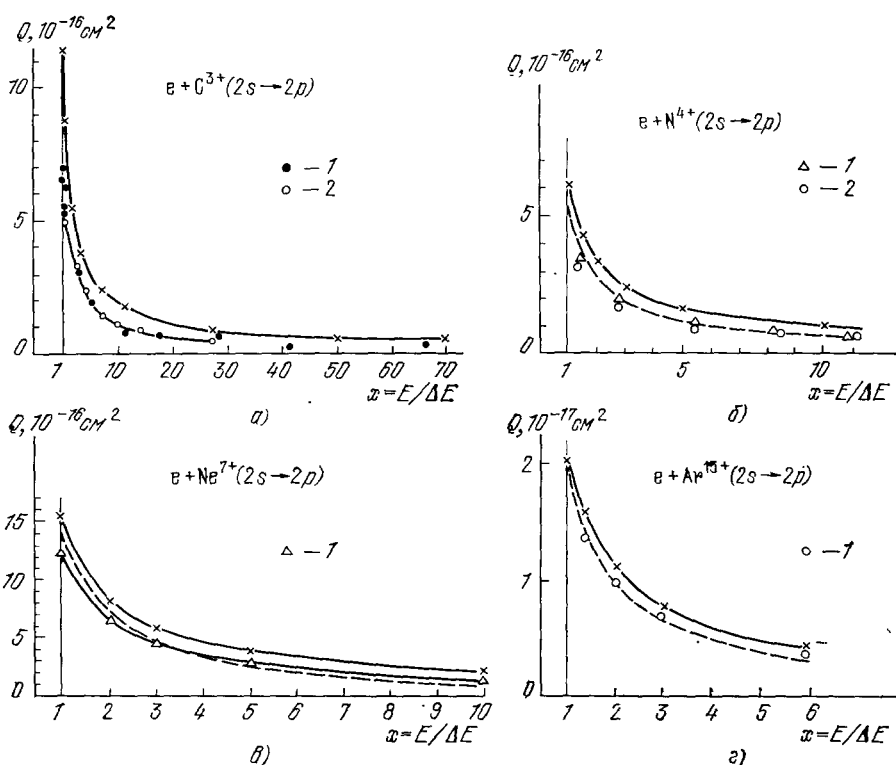


Рис. 8. Сечения возбуждения электронами литиевоподобных ионов как функции энергии в пороговых единицах  $x = E/\Delta E$ .

—×— формула (8), — — — ее предел (17); а) 1 — эксперимент<sup>60</sup>; 2 — метод сильной связи (2s, 2p, 3s, 3p)<sup>58</sup>; б) 1 — метод КВ<sup>58</sup>; 2 — сильная связь<sup>57</sup>; в) 1 — метод КВ<sup>58</sup>; г) 1 — сильная связь<sup>58</sup>.

Разности энергий брались из расчетов Ивановой и Сафроновой <sup>42</sup>:

$$\Delta E_{2s-2p} \{Li\} = 0,0707Z - 0,120; \quad (48)$$

здесь  $Z$  — заряд ядра, в отличие от  $Z_2$ , — заряда иона.

Из рис. 8 видно, что результаты из всех источников хорошо согласуются друг с другом при достаточно больших  $Z$ . Исключением является ион  $C^{3+}$ , для которого формула (8) в 1,5—2 раза завышает результат (что можно объяснить недостаточной малостью  $Z_2^{-1}$  для этого иона), тогда как результаты, полученные методом сильной связи, совпадают с экспериментальными результатами.

Для больших зарядов иона  $Z_2$  становятся существенными различия тонких компонент  $2P_{1/2}$  и  $2P_{3/2}$ , так что следует различать два дипольных перехода  $2S_{1/2} \rightarrow 2P_{1/2}$  и  $2S_{1/2} \rightarrow 2P_{3/2}$ . В табл. II приведены параметры

Таблица II

Параметры  $f$  и  $\Delta E$  <sup>62</sup> и сечения возбуждения литиевоподобных ионов железа и молибдена, вычисленные по формуле (8) для электронов ( $Q_e$ ) и формуле из <sup>52</sup> для протонов ( $Q_p$ )

Fe <sup>23+</sup>						
$\Delta E$	1s <sup>2</sup> 2s   S → 1s <sup>2</sup> 2p   P <sub>3/2</sub> 2,571 a.e. = 64,51 эВ			1s <sup>2</sup> 2s   S → 1s <sup>2</sup> 2p   P <sub>1/2</sub> 1,785 a.e. = 48,57 эВ		
$f$	0,048			0,018		
$E$ , кэВ	0,5	1	2	0,5	1	2
$Q_e$	5,0·10 <sup>-19</sup> см <sup>2</sup>	3,1·10 <sup>-19</sup> см <sup>2</sup>	1,9·10 <sup>-19</sup> см <sup>2</sup>	2,6·10 <sup>-19</sup> см <sup>2</sup>	1,6·10 <sup>-19</sup> см <sup>2</sup>	1,0·10 <sup>-19</sup> см <sup>2</sup>
$Q_p$	10 <sup>-43</sup> см <sup>2</sup>	3·10 <sup>-26</sup> см <sup>2</sup>	5·10 <sup>-20</sup> см <sup>2</sup>	10 <sup>-38</sup> см <sup>2</sup>	4·10 <sup>-24</sup> см <sup>2</sup>	2,6·10 <sup>-19</sup> см <sup>2</sup>
Mo <sup>39+</sup>						
$\Delta E$	1s <sup>2</sup> 2s   S → 1s <sup>2</sup> 2p   P <sub>3/2</sub> 7,881 a.e. = 214,44 эВ			1s <sup>2</sup> 2s   S → 1s <sup>2</sup> 2p   P <sub>1/2</sub> 3,276 a.e. = 89,14 эВ		
$f$	0,056			0,011		
$E$ , кэВ	0,5	1	2	0,5	1	2
$Q_e$	1,4·10 <sup>-19</sup> см <sup>2</sup>	8,1·10 <sup>-20</sup> см <sup>2</sup>	4,7·10 <sup>-20</sup> см <sup>2</sup>	7,5·10 <sup>-20</sup> см <sup>2</sup>	4,4·10 <sup>-20</sup> см <sup>2</sup>	2,7·10 <sup>-20</sup> см <sup>2</sup>
$Q_p$	0	0	10 <sup>-36</sup> см <sup>2</sup>	0	0	1,2·10 <sup>-25</sup> см <sup>2</sup>

этих переходов для ионов железа Fe<sup>23+</sup> и молибдена Mo<sup>39+</sup> <sup>62</sup>, а также сечения их возбуждения электронами и протонами (см. работу <sup>52</sup>) при энергиях 0,5; 1 и 2 кэВ \*). Видно, что протонные сечения из-за расталкивания в этой области энергий очень малы, но резко возрастают с ростом  $E$ .

#### б) Бериллиевоподобные ионы {Be}, переход 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup> | <sup>1</sup>S → 1s<sup>2</sup>2s2p | <sup>1</sup>P

Силы столкновения и сечения для этого перехода рассчитывались методом сильной связи Остерброком <sup>65</sup> для ионов В<sup>+</sup>, С<sup>2+</sup>, N<sup>3+</sup>, О<sup>4+</sup>, Ne<sup>8+</sup>. Паркс и Сэмпсон <sup>66</sup> рассчитали сечения этого перехода с помощью водородоподобных функций методом КБ для предела  $Z = \infty$ . Беррингтон и др. <sup>67</sup> исследовали резонансы в силах столкновения для ионов С<sup>2+</sup> и О<sup>4+</sup>. Наказани и Хашино <sup>68</sup> в рамках метода КБ анализировали роль

\*) Недавно измеренные <sup>64</sup> значения сил осцилляторов Fe<sup>23+</sup> совпадают с приведенными в табл. II.

различных приближений для волновых функций связанных электронов ионов.

Некоторую трудность для численных расчетов сечений рассматриваемых переходов составляет то обстоятельство, что в этом случае вносят вклад много моментов налетающего электрона. В работе Остерброка<sup>65</sup> приведены парциальные сечения для возбуждения состояний  $2s2p \mid ^1, ^3P$

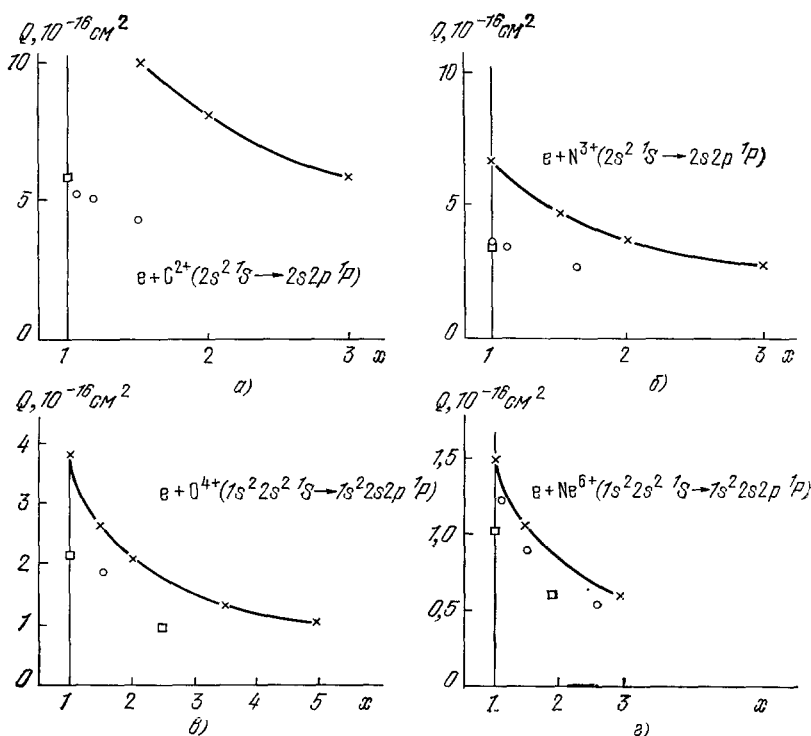


Рис. 9. Сечения возбуждения электронами бериллиевоподобных ионов как функция  $x = E/\Delta E$ .

○ — расчет<sup>66</sup> методом сильной связи; □ — расчет<sup>68</sup> методом КБ; × — формула (8) с параметрами  $f$  и  $\Delta E$ , равными<sup>46</sup>: а)  $f = 0,81$ ,  $\Delta E = 0,466$ , б)  $f = 0,64$ ,  $\Delta E = 0,595$ ; в)  $f = 0,53$ ,  $\Delta E = 0,723$ ; г)  $f = 0,57$ ,  $\Delta E = 0,979$ .

ионов  $C^{2+}$  и  $O^{4+}$  в припороговой области энергий. Для возбуждения интеркомбинационного перехода в состояние  $^3P$  существенны только 3—4 момента, тогда как для возбуждения дипольно-разрешенного перехода в  $^1P$  — 10 моментов.

На рис. 9 сравниваются сечения, вычисленные по формуле (8), с параметрами  $f$  и  $\Delta E$ , взятыми из спектроскопических данных<sup>46</sup>, и сечения, полученные методом сильной связи Остерброком<sup>65</sup> для ионов  $C^{2+}$ ,  $N^{3+}$ ,  $O^{4+}$  и  $Ne^{6+}$  и Наказаки, Хашино<sup>68</sup>.

Спектроскопические данные<sup>46</sup>,<sup>63</sup> можно аппроксимировать зависимостями

$$f_{2s^2 \rightarrow 2s2p \mid ^1P} \{Be\} = \frac{3,30}{Z} + \frac{5,60}{Z^2}, \quad (49)$$

$$\Delta E_{2s^2 \rightarrow 2s2p \mid ^1P} \{Be\} = 0,132Z - 0,350. \quad (50)$$

в) Натриевоподобные ионы {Na},  
переход  $3s \rightarrow 3p$

Аппроксимационные зависимости табличных значений <sup>46</sup> сил осцилляторов и энергий перехода таковы:

$$f_{3s \rightarrow 3p} \{Na\} = \frac{8,44}{Z} - \frac{28,8}{Z^2}, \quad (51)$$

$$\Delta E_{3s \rightarrow 3p} \{Na\} = 0,076Z - 0,732. \quad (52)$$

В работе Блахы и Дэвиса <sup>69</sup> методом возмущенных волн без обмена были вычислены силы столкновений переходов  $3s \rightarrow 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f$  для ионов Ca X, Fe XVI, Kr XXVI, Mo XXXII. В этой же работе приведены энергии возбуждения и силы осцилляторов рассмотренных переходов этих ионов. Сравним сечения возбуждения переходов  $3S \rightarrow 3P_{1/2}, 3P_{3/2}$  иона Mo XXXII ( $3S \rightarrow 3P_{1/2}$ :  $\Delta E = 2,57$  а. е.,  $f = 0,073$ ;  $3S \rightarrow 3P_{3/2}$ :  $\Delta E = 3,53$  а. е.,  $f = 0,201$ ), даваемые формулой (8), с полученными в <sup>69</sup>. По формуле (8) получаем:  $x = 1$ :  $Q(3S \rightarrow 3P_{1/2}) = 3,5 \times 10^{-18}$  см<sup>2</sup>,  $Q(3S \rightarrow 3P_{3/2}) = 5,0 \cdot 10^{-18}$  см<sup>2</sup>;  $x = 16$ :  $Q(3S \rightarrow 3P_{1/2}) = 3,9 \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>;  $Q(3S \rightarrow 3P_{3/2}) = 5,8 \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>. Соответствующие сечения Блахы и Дэвиса <sup>69</sup> равны:  $x = 1$ :  $Q_{1/2} = 3,5 \cdot 10^{-18}$  см<sup>2</sup>;  $Q_{3/2} = 4,5 \times 10^{-18}$  см<sup>2</sup>;  $x = 16$ :  $Q_{1/2} = 2,9 \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>,  $Q_{3/2} = 4,1 \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>.

Видно, что машинные сечения и здесь (по-видимому, по той же причине, что и для ионов {Li}) несколько меньше сечения (8).

г) Гелиевоподобные ионы {He},  
переходы  $2'S \rightarrow 2'P, 2^3S \rightarrow 2^3P$

Табличные значения сил осцилляторов и разностей энергий <sup>46</sup> аппроксимируются зависимостями

$$2'S \rightarrow 2'P: \begin{cases} f = \frac{0,50}{Z} + \frac{0,33}{Z^2} \\ \Delta E = 0,028Z - 0,040, \end{cases} \quad (53)$$

{He}

$$2^3S \rightarrow 2^3P: \begin{cases} f = \frac{0,67}{Z} + \frac{0,69}{Z^2}, \\ \Delta E = 0,036Z - 0,009, \end{cases} \quad (54)$$

которые позволяют по формуле (8) вычислить сечения.

Помимо дипольных существует большое число недипольных переходов с  $\Delta l = 0$ , для которых  $\Delta E \ll Z^2$ . Сечения их возбуждения электронами, как показывает анализ, не могут быть вычислены с помощью мультипольного разложения межэлектронного взаимодействия, а также классического описания налетающего электрона. Здесь необходимы квантовые расчеты по методу Кулона — Борна с обменом.

Скорости реакций возбуждения  $K = \langle \nu Q \rangle$ , которые определяются сечением (8), получим, усреднив произведение  $\nu Q$  по максвелловской функции распределения электронов по энергиям. Поскольку  $F(\nu)$  — медленно меняющаяся функция энергии электронов  $E$ , то для вычисления  $K$  можно применить способ, предложенный ранее <sup>70</sup>. Тогда

получим

$$K_e = \frac{\sqrt{2} \pi^{5/2} f_{0n}}{(2l_0 + 1) \Delta E \sqrt{T}} e^{-\Delta E/T} F(\tilde{v}), \quad (55)$$

$$\tilde{v} = \frac{Z_2 \Delta E}{[2(\Delta E + 1,78T)]^{3/2}}. \quad (56)$$

Представление скорости реакции в таком виде удобно тем, что для ее вычисления, как и для расчета сечения, можно пользоваться функцией  $F(v)$ , представленной в виде аппроксимационной формулы (46).

Сравним скорости возбуждения перехода  $2s \rightarrow 2p$  литиевopodobного иона аргона  $Ar^{15+}$  ( $\Delta E = 1,15$  а. е.;  $f = 0,082$ ), даваемые формулой (55), с полученными Вайнштейном, Собельманом и Юковым<sup>2</sup>. При трех значениях температуры:  $T = \Delta E/2 = 0,575$ ;  $T = \Delta E = 1,15$ ;  $T = 3\Delta E = 3,45$ , формула (55) дает соответственно  $K = 1,6$ ;  $3,3$ ;  $4,2 \cdot 10^{-9}$  см<sup>3</sup>/с. Соответствующие значения, полученные в<sup>2</sup>, равны:  $1,5$ ;  $2,5$ ;  $3,2 \cdot 10^{-19}$  см<sup>3</sup>/с.

## 5. ВОЗБУЖДЕНИЕ ПЕРЕХОДОВ С $\Delta n \neq 0$

### а) Гелиевopodobные ионы

Обратимся теперь к сечениям переходов с изменением главного квантового числа, для возбуждения которых требуется энергия  $\sim Z^2$ .

Сечения возбуждения состояний  $2^1, {}^3S$  и  $2^1, {}^3P$  гелиевopodobных ионов  $Li^+$ ,  $Be^{2+}$ ,  $B^{3+}$ ,  $C^{4+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{6+}$ ,  $F^{7+}$ ,  $Ne^{8+}$ ,  $Si^{12+}$ ,  $Ca^{18+}$ ,  $Fe^{24+}$  из основного состояния  $1S$  были вычислены в работе<sup>71</sup> в нерелятивистском приближении методом искаженных волн с обменом, а также методом КБ. Сечения возбуждения состояний  $2^1S$  и  $2^1P$  для ионов с  $3 \leq Z \leq 10$  и  $Si^{12+}$ ,  $Ca^{18+}$ ,  $Fe^{24+}$  в работе<sup>26</sup> были вычислены методом возмущенных волн с поляризованными орбиталями с учетом обмена также в нерелятивистском приближении. Методом КБ без обмена сечения возбуждения состояний  $n'S$ ,  $n'P$  ( $n = 2 - 6$ ) были вычислены Талли<sup>72</sup>. Методом КБО сечения возбуждения гелиевopodobных ионов вычислялись также в<sup>73, 74</sup>.

Ввиду справедливости теории возмущений наиболее последовательным для расчета сечений является метод КБО с водородоподобными функциями. Такие расчеты проделаны в<sup>75</sup> ( $1S \rightarrow 2^3P$ ,  $1'S \rightarrow 2^3S$ ,  $Z = \infty$ ) и в<sup>76</sup> ( $1'S \rightarrow n^{1,3}S$ ,  $P$ ,  $D$ ;  $2^{1,3}S \rightarrow n^{1,3}S$ ,  $P$ ,  $D$ ,  $n = 2 \div 5$ ).

На рис. 10 показаны приведенные сечения  $Z^4Q$  возбуждения состояний  $2^1, {}^3S$  и  $2^1, {}^3P$  из основного  $1'S$  электронным ударом, вычисленные различными методами. Видно, что результаты разных методов удовлетворительно согласуются между собой. Исключение составляет сечение возбуждения состояния  $2^3P$ , полученное в<sup>76</sup>, что является, по-видимому, вычислительной ошибкой. Близость результатов, полученных разными методами, объясняется применимостью теории возмущений. Из рис. 10 видно, что с увеличением заряда иона результаты, полученные Бхатия и Темкиным<sup>71</sup>, приближаются к кривым, полученным с водородоподобными функциями<sup>75, 76</sup>.

На рис. 11 показаны дважды приведенные сечения возбуждения  $n^3Z^4Q$  более высоких уровней ( $n = 3, 4, 5$ ) из основного состояния  $1'S$ , вычисленные методом КБО с водородоподобными функциями Сэмпсоном, Парксом и Кларком<sup>76</sup>. Видна довольно хорошая сходимость с ростом  $n$  этих сечений к универсальным функциям от  $x$ , которые мы

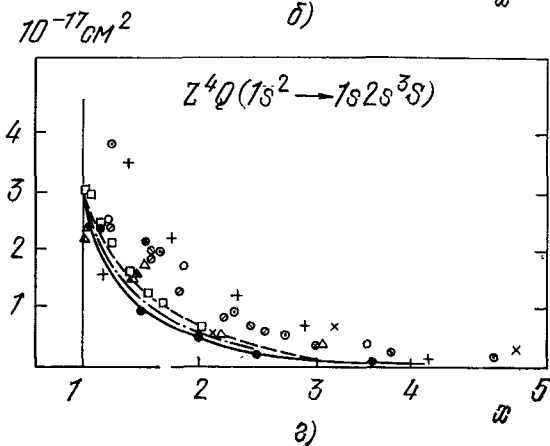
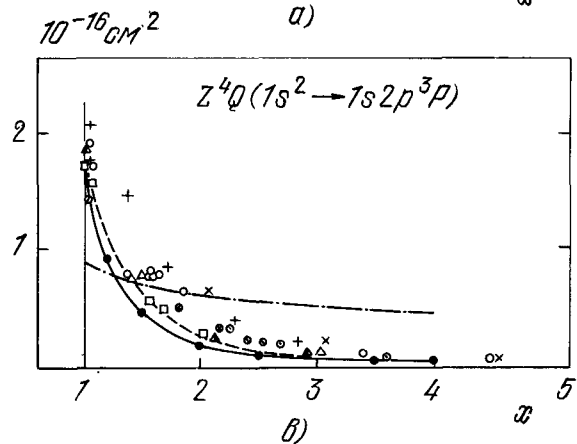
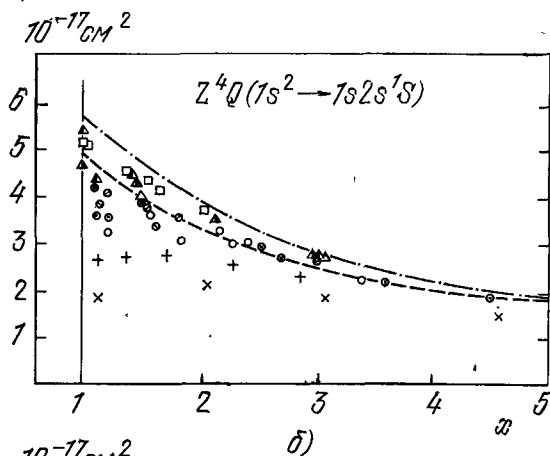
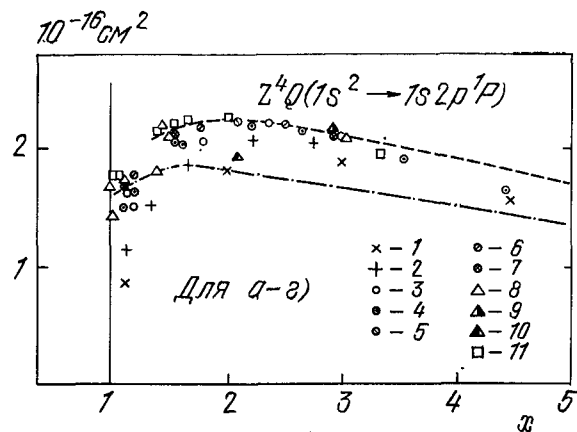


Рис. 10. Приведенные сечения  $Z^4Q$  возбуждения состояний гелиевоподобных ионов электронами.

Расчет методом искаженных волн с обменом Бхатия и Темкина<sup>71</sup>: 1 —  $\text{Li}^+$ ; 2 —  $\text{Be}^{2+}$ ; 3 —  $\text{B}^{3+}$ ; 4 —  $\text{C}^{4+}$ ; 5 —  $\text{N}^{5+}$ ; 6 —  $\text{O}^{6+}$ ; 7 —  $\text{F}^{7+}$ ; 8 —  $\text{Ne}^{8+}$ ; 9 —  $\text{Si}^{12+}$ ; 10 —  $\text{Ca}^{18+}$ ; 11 —  $\text{Fe}^{24+}$ . Расчет методом КВО с водородоподобными функциями: —  $\circ$  —  $^{71}$ , —  $\bullet$  —  $^{76}$ ; — — — аппроксимирующие зависимости: а)  $\left(\frac{1,70}{x^2} + \frac{5,35 \ln x}{x}\right) \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$ ; б)  $\left(5 + 2,55 \ln x\right) x^{-1} \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$ ; в)  $\frac{1,8}{x} \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$ ; г)  $\left(\frac{8,2}{x^3} - \frac{5,2}{x^4}\right) \cdot 10^{-17} \text{ см}^2$ .



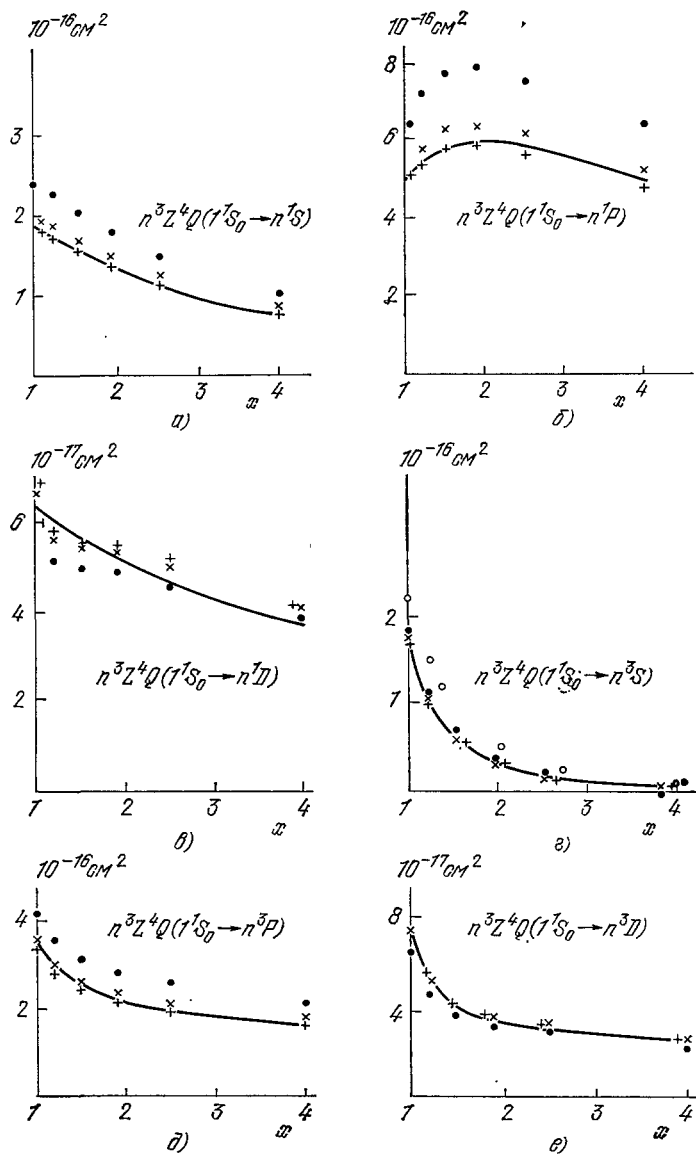


Рис. 11. Дважды приведенные сечения  $n^3 Z^4 Q$  возбуждения состояний  $n^1, ^3S$ ,  $n^1, ^3P$ ,  $n^1, ^3D$  ( $n = 3, 4, 5$ ) из основного состояния гелиевоподобных ионов электронным ударом, вычисленные методом КБО с водородоподобными функциями <sup>78</sup>.

○ —  $n = 2$ , ● —  $n = 3$ , × —  $n = 4$ , + —  $n = 5$ . — — аппроксимирующие зависимости (57) — (60).

аппроксимировали зависимостями ( $Z$  — номер элемента):

{He}

$$n^3Z^4Q(1's \rightarrow n'S) = \left( \frac{3,38}{x} - \frac{1,53}{x^2} \right) \cdot 10^{-16} \text{ см}^2, \quad (57)$$

$$n^3Z^4Q(1s \rightarrow n^3S) = \left( \frac{2,82}{x^3} - \frac{1,32}{x^4} \right) \cdot 10^{-16} \text{ см}^2, \quad (58)$$

$$n^3Z^4Q(1's \rightarrow n'P) = \left( \frac{13,7 \ln x}{x} + \frac{5,0}{x^2} \right) \cdot 10^{-16} \text{ см}^2, \quad (59)$$

$$n^3Z^4Q(1's \rightarrow n^3P) = \frac{3,40 + 2,16 \ln x}{x} \cdot 10^{-16} \text{ см}^2, \quad (60)$$

$$n^3Z^4Q(1'S \rightarrow n'D) = \frac{6,30 + 5,6 \ln x}{x} \cdot 10^{-17} \text{ см}^2, \quad (61)$$

$$n^3Z^4Q(1's \rightarrow n^3D) = \left( \frac{6,6}{x} + \frac{0,4}{x^2} \right) \cdot 10^{-17} \text{ см}^2. \quad (62)$$

Эти зависимости позволяют вычислить сечения возбуждения уровней с любым  $n \geq 3$  для любого иона  $Z_2 \geq 4$ .

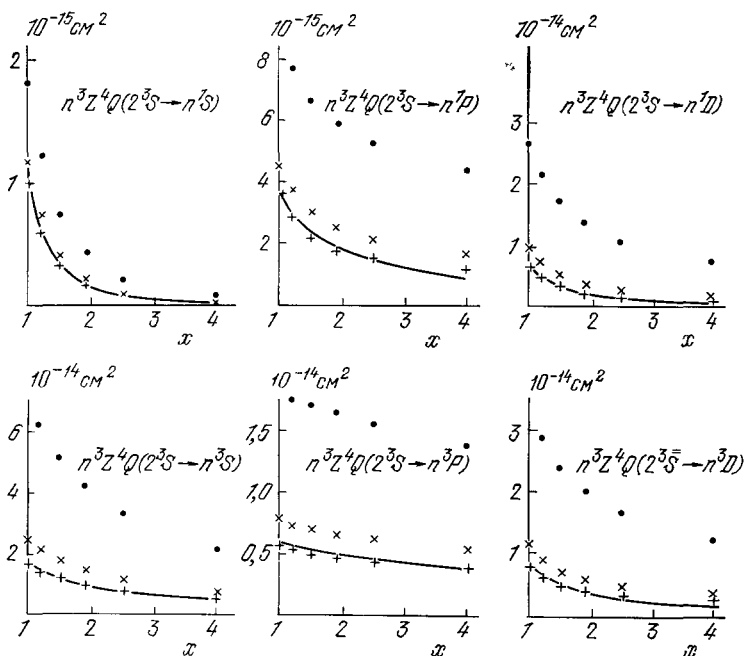


Рис. 12. Дважды приведенные сечения  $n^3Z^4Q$  возбуждения состояний  $n^1,^3S, P, D$  ( $n = 3, 4, 5$ ) из метастабильного состояния  $2^3S$  гелиевоподобных ионов электронным ударом, вычисленные методом КБО<sup>76</sup>.

● —  $n = 3$ , × —  $n = 4$ , + —  $n = 5$ . — — аппроксимирующие зависимости (63)–(68).

Аппроксимирующие зависимости (57) — (62) справедливы в области  $1 \leq x \leq 10$ .

На рис. 12 показаны также дважды приведенные сечения возбуждения состояний  $n^3Z^4Q$  ( $n = 3, 4, 5$ ) из метастабильного состояния  $2^3S$ , вычисленные теми же авторами<sup>76</sup> и тем же методом. Аппроксимирующие

зависимости этих сечений таковы:

{He}

$$n^3Z^4Q(2^3S \rightarrow n^1S) = \frac{10^{-15} \text{ см}^2}{x}, \quad (63)$$

$$n^3Z^4Q(2^3S \rightarrow n^3S) = \frac{1,7 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2}{x}, \quad (64)$$

$$n^3Z^4Q(2^3S \rightarrow n^1P) = \frac{3,6 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2}{x}, \quad (65)$$

$$n^3Z^4Q(2^3S \rightarrow n^3P) = \frac{5,5 + 6,7 \ln x}{x} \cdot 10^{-15} \text{ см}^2, \quad (66)$$

$$n^3Z^4Q(2^3S \rightarrow n^1D) = \left( \frac{9,0}{x^2} - \frac{2,0}{x^3} \right) \cdot 10^{-15} \text{ см}^2, \quad (67)$$

$$n^3Z^4Q(2^3S \rightarrow n^3D) = \left( \frac{16,5}{x^2} - \frac{9,0}{x^3} \right) \cdot 10^{-15} \text{ см}^2. \quad (68)$$

Анализ возбуждения водородоподобных ионов показал, что учет обмена слабо влиял на величины сечений. Для гелиевоподобных ионов положение иное: возбуждение интеркомбинационных переходов — с изменением спина — невозможно без обмена налетающего электрона со связанными. Однако обмен существенно сказывается и на величинах сечений возбуждения переходов без изменения спина. Сечения возбуждения гелиевоподобных ионов  $C^{4+}$ ,  $N^{5+}$ ,  $O^{6+}$ ,  $Ne^{8+}$  из основного состояния в  $2^1P$  и  $3^1P$ , вычисленные Наказаки <sup>77</sup> методом КБ без обмена, вблизи порога  $\sim$  в 2 раза больше сечений, вычисленных с учетом обмена.

Приведем теперь скорости возбуждения гелиевоподобных ионов электронами  $K$ , усредненные по максвелловской функции распределения электронов по скоростям с температурой  $T$ . Интегрируя аппроксимирующие сечения функции (см. рис. 10), получаем

{He}

$$K(1's_1 \rightarrow 1'2^1P) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{Z^3} (6,07\alpha + 19,1) I(\alpha), \quad (69)$$

$$K(1's \rightarrow 2^1S) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{Z^3} (0,91\alpha + 1,80) I(\alpha), \quad (70)$$

$$K_1(1'S \rightarrow 2^3P) = 12,9 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\alpha^{3/2}}{Z^3} (e^{-\alpha} - \alpha I_1'(\alpha)), \quad (71)$$

$$K(1'S \rightarrow 2^3S) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\alpha^{3/2}}{Z^3} [(2 + 0,93\alpha) e^{-\alpha} - \alpha_1'(2,93 + 0,93\alpha) I(\alpha)], \quad (72)$$

$$\alpha = \frac{\Delta E}{T}$$

Интегральная показательная функция  $I(\alpha)$  определена в формуле (42). Скорости возбуждения высоких состояний, сечения для которых даются формулами (57) — (62), равны:

{He}

$$K(1'S \rightarrow n^1S) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} (12,1e^{-\alpha} - 5,46\alpha I(\alpha)), \quad (73)$$

$$K(1'S \rightarrow n^3S) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\alpha^{3/2}}{n^3 Z^3} [(7,75 + 2,35\alpha) e^{-\alpha} - \alpha(10,1 + 2,35\alpha) I(\alpha)], \quad (74)$$

$$K(1'S \rightarrow n'P) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} (17,9\alpha + 48,9) I(\alpha), \quad (75)$$

$$K(1'S \rightarrow n^3P) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} (12,1e^{-\alpha} + 7,71I(\alpha)), \quad (76)$$

$$K(1'S \rightarrow n'D) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} (2,25e^{-\alpha} + 2I(\alpha)), \quad (77)$$

$$K(1'S \rightarrow n^3D) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} (2,36e^{-\alpha} + 0,14\alpha I(\alpha)). \quad (78)$$

Скорости переходов из возбужденного состояния  $2^3S$ , сечения которых даются формулами (63) — (68), равны:

{He}

$$K(2^3S \rightarrow n'S) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} 35,7e^{-\alpha}, \quad (79)$$

$$K(2^3S \rightarrow n^3S) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} 607e^{-\alpha}, \quad (80)$$

$$K(2^3S \rightarrow n'P) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} 129 e^{-\alpha}, \quad (81)$$

$$K(2^3S \rightarrow n^3P) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} (196 e^{-\alpha} + 239I(\alpha)), \quad (82)$$

$$K(2^3S \rightarrow n'D) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} [-71\alpha e^{-\alpha} + (321\alpha + 71\alpha^2) I(\alpha)], \quad (83)$$

$$K(2^3S \rightarrow n^3D) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} [-321\alpha e^{-\alpha} + (321\alpha + 589\alpha^2) I(\alpha)]. \quad (84)$$

Сравним имеющиеся результаты экспериментальных измерений суммарных скоростей возбуждения переходов  $1'S \rightarrow (2'P + 2'S)$   $1'S \rightarrow (2^3P + 2^3S)$  иона  $O^{6+}$  <sup>78</sup>, выполненных при температуре электронов 250 эВ, со скоростями, даваемыми формулами (69) — (72), и с расчетом Вайнштейна, Собельмана, Юкова <sup>2</sup>. Экспериментальные значения:  $K_{2'S+2'P} = 3,1 \cdot 10^{-11}$  см<sup>3</sup>/с,  $K_{2^3S+2^3P} = 1,5 \cdot 10^{-11}$  см<sup>3</sup>/с. Ошибка в определении этих величин, по мнению авторов <sup>78</sup>, составляет 100%. Формулы (69) — (72) дают следующие величины ( $T = 250$  эВ):  $K_{2'S+2'P} = 2,1 \cdot 10^{-11}$  см<sup>3</sup>/с,  $K_{2^3S+2^3P} = 0,67 \cdot 10^{-11}$  см<sup>3</sup>/с. Из таблиц работы <sup>2</sup> находим:  $K_{2'S+2'P} = 3,8 \cdot 10^{-11}$  см<sup>3</sup>/с,  $K_{2^3S+2^3P} = 2,2 \cdot 10^{-11}$  см<sup>3</sup>/с. Результаты теоретических источников, расходясь между собой, в общем согласуются с экспериментом в пределах его ошибок. При температуре 250 эВ, которая в 2,2 раза ( $\alpha = 2,2$ ) меньше передаваемой энергии  $\Delta E$ , основной вклад в  $K$  дают значения сечений вблизи порога. Эти значения сечений, показанные на рис. 10 и из расчетов работы <sup>2</sup>, достаточно близки друг другу.

#### б) Литиевоподобные ионы

Методом КБ без обмена сечения переходов  $2s \rightarrow np$  ( $n = 2 - 7$ ) ионов  $Be^+$ ,  $N^{4+}$  и  $Ne^{7+}$  рассчитаны Били <sup>54</sup>. Гау и Генри <sup>58</sup> использовали метод сильной связи с обменом состояний  $1s^2 2s$ ,  $1s^2 2p$ ,  $1s^2 3s$ ,  $1s^2 3p$ ,  $1s^2 3d$  для расчета сечений возбуждения переходов  $2s \rightarrow 2p$ ,  $3s$ ,  $3p$ ,  $3d$ ,  $2p \rightarrow 3s$ ,  $3d$ ,  $3p \rightarrow 3s$  у ионов  $C^{3+}$  и  $Ar^{15+}$ . В обоих расчетах использовались хартри — фоковские волновые функции связанных электронов. Электроны остова  $1s^2$  считались «замороженными», т. е. их волновая функция не менялась при переходах внешнего электрона  $2S$ . На рис. 13 показаны приведенные

сечения  $Z^4Q$  возбуждения перехода  $2s \rightarrow 3p$  некоторых ионов. Видно, что обмен хотя и меняет характер энергетической зависимости сечений вблизи порога, но это изменение количественно невелико. Исключение составляет ион  $C^{3+}$ , для которого еще плохо выполняется теория возмущений. Как видно из рис. 13, сечение  $Z^4Q$  этого перехода хорошо передается аппроксимирующей зависимостью. Спектроскопические значения энергий возбуждения  $\Delta E$  перехода  $2s \rightarrow 3p$  можно аппроксимировать выражением

$$\{Li\}, \quad \Delta E(2s \rightarrow 3p) = 0,069Z^2 - 0,175Z + 0,024. \quad (85)$$

Константа скорости этого перехода тогда равна:

$$K_{2s \rightarrow 3p}^{(Li)} = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{Z^3} (185 + 98\alpha) I(\alpha). \quad (86)$$

Дважды приведенные сечения  $n^3Z^4Q$  возбуждения переходов  $2s \rightarrow np$ , вычисленные Били<sup>54</sup> методом КБ без учета обмена, для ионов  $N^{4+}$ ,  $Ne^{7+}$

хорошо аппроксимируются зависимостью  $\left(\frac{4,0}{x^2} + \frac{6,6 \ln x}{x}\right) \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$ , что дает следующую константу скорости для этих переходов:

$$K_{2s \rightarrow np}^{(Li)} = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z^3} (2,4 \cdot 10^3 + 1,4 \cdot 10^3 \alpha) I(\alpha). \quad (87)$$

Используя результаты расчетов методом сильной связи с обменом<sup>58</sup> для иона  $Ar^{15+}$ , приведем следующие аппроксимирующие зависимости для констант скоростей:

$\{Li\}$

$$2s \rightarrow 3s: \quad K = \sqrt{\frac{2\pi}{\Delta E}} \frac{\sqrt{\alpha}}{2Z^2} e^{-\alpha} \left(9,6 + \frac{0,7}{\alpha}\right), \quad (88)$$

$$2s \rightarrow 3d: \quad K = \sqrt{\frac{2\pi}{\Delta E}} \frac{\sqrt{\alpha}}{2Z^2} e^{-\alpha} \left(19,0 + \frac{3,5}{\alpha}\right), \quad (89)$$

$$2p \rightarrow 3s: \quad K = \sqrt{\frac{2\pi}{\Delta E}} \frac{\sqrt{\alpha}}{6Z^2} (2,2e^{-\alpha} + \alpha I(\alpha)), \quad (90)$$

$$2p \rightarrow 3p: \quad K = \sqrt{\frac{2\pi}{\Delta E}} \frac{\sqrt{\alpha}}{6Z^2} (22e^{-\alpha} + 2,5\alpha I(\alpha)). \quad (91)$$

$$2p \rightarrow 3d: \quad K = \sqrt{\frac{2\pi}{\Delta E}} \frac{\sqrt{\alpha}}{6Z^2} (91e^{-\alpha} + 68\alpha I(\alpha)). \quad (92)$$

Эти зависимости справедливы в областях  $1 \leq x \leq 5 - 10$ ,  $0,2 \leq \alpha \leq \infty$ .

В работе Преснякова и Урнова<sup>3</sup> методом сильной связи был вычислен вклад в сечение резонансных процессов возбуждения для переходов  $2s \rightarrow 3s$ ,  $2p \rightarrow 3s$  литиевоподобного кислорода  $O^{5+}$ . Резонансное рассеяние в узкой области энергий существенно увеличивает сечение, но его вклад в константу  $K$  невелик.

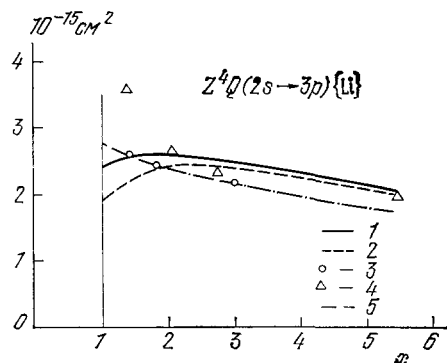


Рис. 13. Приведенные сечения  $Z^4Q$  ( $2s \rightarrow 3p$ ) возбуждения перехода  $2s \rightarrow 3p$  у литиевоподобных ионов электронным ударом.

Метод КБ без обмена<sup>54</sup>: 1 —  $Ne^{7+}$ ; 2 —  $N^{4+}$ . Метод сильной связи состояния  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$  с обменом<sup>58</sup>: 3 —  $Ar^{15+}$ ; 4 —  $C^{3+}$ ; 5 — аппроксимирующая зависимость  $(2,7 x^{-2} + 5,2 x^{-1} \ln x) 10^{-15} \text{ см}^2$ .

## в) Бериллиевоподобные ионы

Сечение интеркомбинационного перехода  $2s^2\ ^1S' \rightarrow 2s2p\ ^3P$  с малой энергией возбуждения

$$\Delta E = 0,068Z - 0,170 \quad (93)$$

вычислено Остерброком<sup>65</sup> методом сильной связи для ионов  $B^+$ ,  $C^{2+}$ ,  $N^{3+}$ ,  $O^{4+}$ ,  $Ne^{6+}$ . Были учтены вклады резонансных конфигураций  $2s2p\ ^1P$ ,  $nl$  при усреднении по  $nl$  с использованием формулы Гайлитиса<sup>79</sup>. Силы столкновения для возбуждения этого перехода ионов  $C^{2+}$ ,  $O^{4+}$  графически представлены также в работе<sup>67</sup>.

Константа скорости для сечения этого перехода была получена нами с помощью аппроксимирующей зависимости сечения  $Z^4Q$ :

$$K(2s^2\ ^1S' \rightarrow 2s2p\ ^3P) = 2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z^2}} \frac{\sqrt{\alpha}}{Z^3} [2,7 \cdot 10^3 e^{-\alpha} + 1,25 \cdot 10^3 \alpha I(\alpha)]. \quad (94)$$

Силы осциллятора излучательного перехода  $2s2p\ |^3P \rightarrow 2s^2\ |^1S'$  растет с ростом  $Z$  и для иона фосфора  $p^{11+}$  составляет  $1,1 \cdot 10^{-4}$ .

Силы столкновения для переходов с изменением главного квантового числа бериллиевоподобных ионов из основного состояния  $2s^2$  и состояний  $2s2p\ ^1,^3P$  были вычислены Парксом и Сэмпсоном<sup>80</sup> методом КБО с обменом с использованием водородоподобных одноэлектронных функций. Рассматривался предел  $Z = \infty$ . Учитывалось смещение конфигураций начальных и конечных состояний, вызванное релятивистскими эффектами. Результаты представлены для двух значений энергий в пороговых единицах:  $x = 1$  и  $1,5$ .

## 6. ИОНИЗАЦИЯ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

Ионизация многозарядных ионов экспериментально изучена в большей степени, чем возбуждение. В работах Донца с сотрудниками<sup>36-38</sup> методом ионной ловушки наблюдалась ионизация атомов до весьма большой кратности — наблюдались ионы  $He^{37+}$ . Из данных по наблюдению за эволюцией спектра ионов в ловушке путем решения системы уравнений ионизационного баланса были получены сечения ионизации ионов всех кратностей атомов азота, кислорода и аргона. Эти сечения показаны на рис. 14 вместе с результатами расчетов Сэлопа<sup>81</sup> методом парных столкновений налетающего электрона со связанными в классическом рассмотрении (модификация метода Гризинского). В работе<sup>81</sup> расчеты проделаны для всех ионов атомов C, N, O, Ne, Ar. На рис. 13, а приведены также сечения ионизации ионов  $N^{3+}$  и  $N^{4+}$ , рассчитанные Мури-сом<sup>82</sup> в кулон-борновском приближении без обмена. Результаты этого расчета удовлетворительно согласуются с результатами Сэлопа<sup>81</sup>.

В расчетах Сэлопа<sup>81</sup> при ионизации ионов аргона с небольшим количеством электронов в оболочке с главным квантовым числом  $n = 3$  учитывалась также ионизация из оболочки  $2p^6$ , что заметно увеличивало сечение.

В книге Вайнштейна, Собельмана, Юкова<sup>2</sup> приведены вычисленные скорости ионизации ионов вплоть до неоноподобных.

Сравнение приведенных на рис. 14 данных показывает, что теоретические сечения хорошо, а экспериментальные хуже, следуют закону  $Z^{-4}$ . В работах<sup>83, 84</sup> измерялись коэффициенты ионизации  $K_{ion}$  некоторых ионов азота, кислорода и неона в плазме тэта-пинча. Измерялось свечение этих ионов, что давало информацию об их концентрации. Коэффициент ионизации литиевоподобного кислорода оказался равным:  $K_{ion}(T = 128 \text{ эВ}) = 2,2 \cdot 10^{-9} \text{ см}^3/\text{с}$ ;  $K_{ion}(119 \text{ эВ}) = 2,6 \cdot 10^{-9} \text{ см}^3/\text{с}$ . Оценивая

сечение ионизации с помощью соотношения  $Q = K/v$ , получим, используя эти скорости, следующие значения:  $Q_{\text{ion}}(128 \text{ эВ}) = 3,2 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$ ,  $Q_{\text{ion}}(119 \text{ эВ}) = 3,8 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$ . Эти значения примерно в 2–3 раза больше,

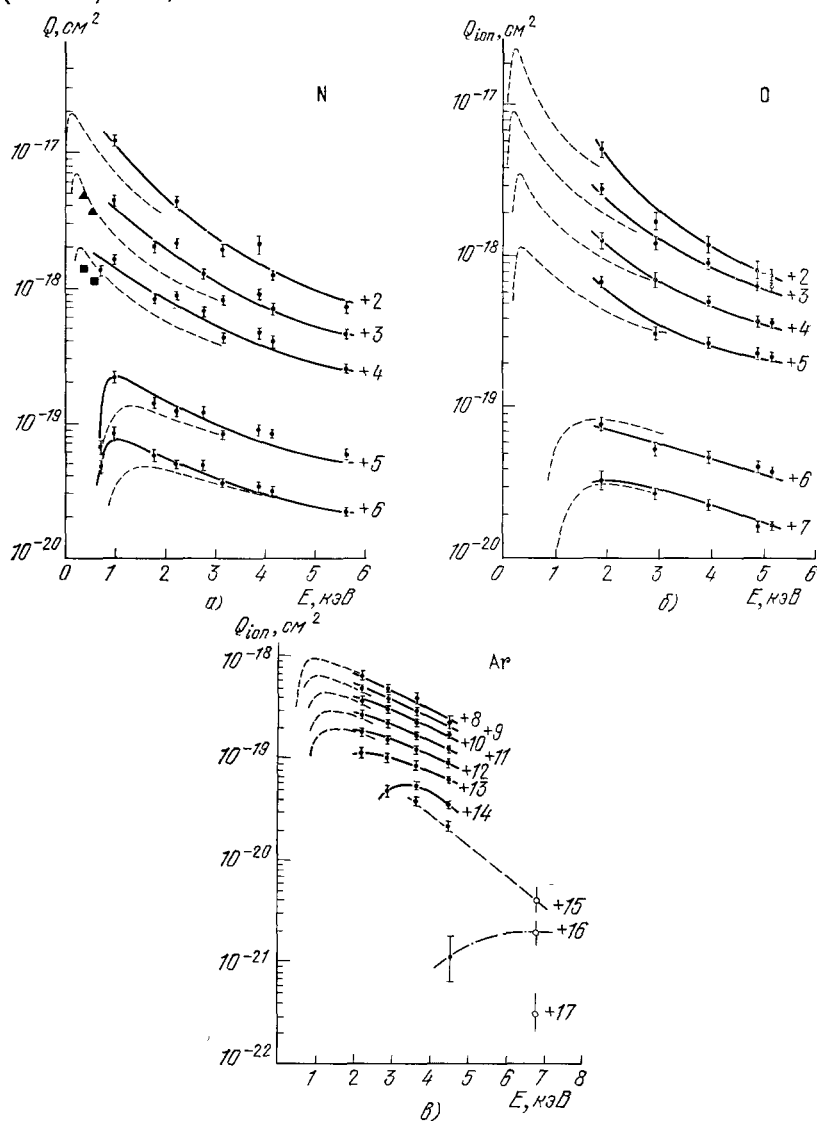


Рис. 14. Сечения ионизации ионов азота (а), кислорода (б) и аргона (в).

—●— эксперимент <sup>38</sup>; — — — расчет Сэллопа <sup>81</sup> бинарным классическим методом; кулон-борновское приближение <sup>82</sup>; ▲ —  $\text{N}^{2+}$ , ■ —  $\text{N}^{4+}$ .

чем сечения Сэллопа <sup>81</sup> (см. рис. 14, б). Экстраполяция измеренных сечений <sup>38</sup> в область малых энергий (120 эВ) (см. рис. 14, б) дает хорошее качественное согласие с приведенными выше экспериментальными значениями.

Раджем и Шварцем <sup>85</sup> были вычислены сечения ионизации ионов Fe XV и Fe XVI методом КБ и КБО.

В работе <sup>86</sup> был повторен расчет Раджа и Шварца (см. <sup>49</sup>) с использованием водородоподобных функций методом КБО и получено хорошее совпадение результатов.

Полученные сечения <sup>85, 86</sup> хорошо описываются эмпирической формулой Лотца <sup>87</sup>

$$Q_{\text{ion}}^{nl} = \frac{4,5 \cdot 10^{-14} \text{ см}^2}{(I_{nl})^2} N_{nl} \frac{\ln X_{nl}}{X_{nl}}, \quad (95)$$

где  $I_{nl}$  — потенциал ионизации в эВ оболочки  $nl$ , из которой удаляется электрон,  $N_{nl}$  — число эквивалентных электронов в оболочке  $nl$ ,  $X_{nl} = E/I_{nl}$ .

Сравнение формулы Лотца (95) с экспериментальными результатами Донца и Овсянникова <sup>88</sup> (см. рис. 14, *е*) выглядит так. При энергии 2 кэВ для ионов  $\text{Ar}^{8+}$  ( $I = 423$  эВ),  $\text{Ar}^{9+}$  ( $I = 479$  эВ),  $\text{Ar}^{10+}$  ( $I = 539$  эВ),  $\text{Ar}^{11+}$  ( $I = 618$  эВ) экспериментальные сечения равны соответственно 7,0; 5,3; 4,0;  $2,7 \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>. Формула же (95) для ионизации только из внешней оболочки дает такие величины: 4,9; 3,3; 2,2;  $1,3 \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>. Увеличивающееся расхождение по мере уменьшения числа ионизуемых электронов можно уменьшить, учитывая (также по формуле (95)) ионизацию  $2s^2$  электронов.

Для ионизации ионов кислорода (см. рис. 14, *б*)  $\text{O}^{6+}$  ( $I = 739$  эВ),  $\text{O}^{7+}$  ( $I = 871$  эВ) экспериментальные сечения при  $E = 2$  кэВ равны соответственно 7,4;  $3,1 \cdot 10^{-20}$  см<sup>2</sup>. Формула же (95) дает величины 5,9;  $2,1 \times 10^{-20}$  см<sup>2</sup>.

Таким образом, во всех проведенных выше сравнениях эмпирическая формула Лотца (95) дает отклонение  $\sim 30\%$ .

Для вычисления вклада внутренних электронов сложных ионов в полное сечение прямой ионизации можно использовать результаты работы <sup>91</sup>, в которой методом КБО вычислены сечения ионизации из оболочек  $1s$ ,  $2s$ ,  $2p$ ,  $3s$ ,  $3p$ ,  $3d$ . Эти расчеты проделаны с водородоподобными волновыми функциями в области энергий  $1,125 \leq x_{nl} \leq 6,0$  в пороговых единицах.

При вычислении сечений ионизации положительных ионов следует учитывать вклад возбуждения автоионизационных состояний этого же иона. Автоионизационные состояния системы ион + налетающий электрон, о которых шла речь в п. в) гл. 1, не могут вносить вклада в ионизацию. Здесь идет речь о других автоионизационных состояниях, образующихся при возбуждении налетающим электроном внутренних электронов на свободные дискретные возбужденные уровни. Эти состояния — состояния исходного иона без налетающего электрона. Автоионизационный распад их приводит к образованию иона следующей кратности, т. е. к ионизации. Существенным отличием этого процесса от процесса возбуждения через стадию автоионизационных состояний является то, что сечение образования промежуточного состояния не носит здесь резонансный характер, а просто равно сечению возбуждения внутреннего электрона. Именно поэтому вклад такого возбуждения в ионизацию может быть и больше вклада прямой ионизации всех оболочек иона.

Особенно большую роль возбуждение внутренних электронов играет для ионов с малым числом внешних электронов. В оценочных расчетах Били <sup>92</sup> для натриевоподобных ионов  $\text{Fe}^{15+}$  ( $1s^2$ ,  $2s^2 2p^6 3s$ ),  $\text{Ca}^{9+}$ ,  $\text{P}^{4+}$ ,  $\text{Al}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{+}$  было получено, что сечение ионизации через образование автоионизационных состояний  $1s^2 2s^2 2p^5 3s 3$  ( $s$ ,  $p$ ,  $d$ ) и  $1s^2 2s 2p^6 3s 3$  ( $s$ ,  $p$ ,  $d$ ) иона атома железа примерно в десять раз превосходит сечение прямой ионизации  $3s$  электрона. В этой работе, однако, не учитывалась излучательная стабилизация автоионизационных состояний, которая конкурирует с автоионизационным распадом. В расчетах Гапа <sup>93</sup> излучательная стабилизация учитывалась на основе аппроксимационной формулы для вероятности излучения, точность которой неопределенна. В работе <sup>94</sup>



проведен более детальный анализ процесса ионизации через возбуждение внутренних электронов для ионов  $\text{Fe}^{15+}$ ,  $\text{Mo}^{31+}$ . Однако скорости прямой ионизации и возбуждения внутренних электронов вычислялись по эмпирическим формулам, точность которых неизвестна.

В экспериментальной работе Кренделла и др.<sup>95</sup> методом пересекающихся пучков ионного и электронного пучков были измерены сечения ионизации литиевоподобных ионов  $\text{C}^{3+}$ ,  $\text{N}^{4+}$ ,  $\text{O}^{5+}$  в области энергий от порога до 15 кэВ. Помимо основного максимума, на зависимости сечения ионизации от скорости ионизирующих электронов при больших энергиях наблюдался второй максимум. Его величина возрастала от  $\text{C}^{3+}$  к  $\text{O}^{5+}$ . Появление второго максимума объяснялось возбуждением автоионизационных состояний  $1s2s^2/{}^2\text{S}$ ,  $1s2s2p/{}^4\text{P}$ ,  ${}^2\text{P}$ . В работе Генри<sup>96</sup> методом сильной связи шести состояний были вычислены сечения возбуждения наблюдавшихся в эксперименте автоионизационных состояний. Вычисленные и измеренные сечения хорошо согласуются друг с другом. Расчеты Муриса<sup>82</sup>, учитывающие только прямую ионизацию из оболочек  $1s^2$  и  $2s$ , не обнаружили второй пик сечения ионизации ионов  $\text{C}^{3+}$ ,  $\text{N}^{4+}$ .

Эти первые работы, бесспорно, указывают на важность эффекта возбуждения внутренних электронов, но его количественный вклад в ионизацию еще не изучен достаточно надежно.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенное сравнение расчетов сечений возбуждения и ионизации многозарядных ионов электронами, выполненных различными методами, обнаруживает хорошее совпадение результатов уже для  $Z_2 \geq 5$ . Это относится и к возбуждению вырожденных уровней. Таким образом, обсуждаемое в обзоре доказательство применимости теории возмущений получило конкретное количественное подтверждение.

Хотя метод КБО может быть реализован только численно, он намного проще других, тоже численных методов. Заметим, что рассеяние электронов на многозарядных ионах представляет собой второй случай в физике электронно-атомных столкновений (помимо приближения Борна), для которого можно дать теоретически строго обоснованный метод расчета сечений.

Для возбуждения дипольных переходов с малой энергией перехода ( $\Delta E < Z_2^2$ ) оказалось возможным рассматривать налетающий электрон как классическую частицу и считать его взаимодействие со связанным электроном как с диполем. В результате такого рассмотрения получается весьма простая аналитическая формула для сечения, справедливая от порога вплоть до борновской области, точность которой также определяется обратной величиной заряда иона.

Исследование релятивистской постановки задачи рассеяния электрона на положительном ионе показывает, что для расчета неупругой амплитуды рассеяния достаточно использовать матричный элемент от оператора Брейта. Количественные расчеты Уолкера<sup>16</sup> возбуждения водородоподобных ионов показывают, что релятивистские эффекты для возбуждения переходов с изменением главного квантового числа становятся заметными для ионов с зарядом  $Z_2 \geq 50$ .

Иная ситуация имеет место для переходов без изменения главного квантового числа. Релятивистские эффекты в непосредственном взаимодействии между налетающим и связанным электронами играют также небольшую роль. Однако изменение параметров связанного электрона (энергия перехода, сила осциллятора) из-за релятивистских эффектов существенно уже для  $Z \geq 20$ . А это, как видно из формул (8), (15), (17),

существенно сказывается на величине сечения как вблизи порога, так и при больших энергиях.

Рассеяние электронов на положительных ионах отличается богатством резонансной структуры в зависимостях сечений от энергии столкновений. Эти резонансы обусловлены образованием автоионизационных состояний системы ион + налетающий электрон. Значение сечения в резонансе примерно в  $Z^2$  раз больше обычного сечения.

Излучательные потери плазмы с термоядерной температурой складываются не только из излучения возбужденных валентных электронов. Наблюдаются также так называемые спутные линии излучения. Они возникают при излучательном переходе из автоионизационного состояния. Для изучения плазмы необходимо знать сечения возбуждения спутных переходов. Сведения о таких сечениях в настоящее время только начинают появляться.

При столкновении с ионом налетающий электрон может возбудить внутренние электроны. В этом случае образуется автоионизационное состояние, которое приводит к ионизации иона. Для ионов с малым числом внешних электронов сечение такой оже-ионизации может существенно превосходить сечение прямой ионизации.

В этом обзоре мы рассматривали относительно простые ионы, имеющие небольшое количество связанных электронов. При переходе к более сложным ионам в приближении КБО появится дополнительная трудность: определение волновых функций нулевого приближения. Эти функции должны учитывать взаимодействие с электронами остова иона.

Институт атомной энергии  
им. П. В. Курчатова

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Пресняков Л. П. — УФН, 1976, т. 119, с. 49.
2. Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. — М.: Наука, 1973; Возбуждение атомов и ионов спектральных линий. — М.: Наука, 1979.
3. Пресняков Л. П., Урнов А. М. — ЖЭТФ, 1975, т. 68, с. 61.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Физматгиз, 1963.
5. Seaton M. J. — Proc. Phys. Soc., 1961, v. 77, p. 184.
6. Bete H. — Ann. d. Phys., 1930, Bd. 5, S. 325.
7. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры. Т. 2. — М.: ИЛ, 1956.
8. Гайлитис М. К. — В кн. Атомные столкновения. — Рига; Изд-во Латв. ун-та, 1963. — с. 93.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. — М.: Наука, 1967.
10. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. — М.: Физматгиз, 1958.
11. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. — М.: Физматгиз, 1963.
12. Чибисов М. П. — Опт. и спектр., 1969, т. 27, с. 9.
13. Базь А. Н. — ЖЭТФ, 1959, т. 36, с. 1762.
14. Гайлитис М. К. — ЖЭТФ, 1963, т. 44, с. 1974.
15. Гайтлер Г. Квантовая теория излучения. — М.: ИЛ, 1958.
16. Walker D. W. — J. Phys. Ser. B, 1975, v. 8, p. 760.
17. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Релятивистская квантовая теория. — М.: Физматгиз, 1968.
18. Burgess A., Hummer D. G., Tully J. A. — Phil. Trans. Roy. Soc. 1970, v. 266, p. 225.
19. Parks A. D., Sampson D. H. — Astrophys. J., 1972, v. 178, p. 571.
20. Mitra S., Sil N. C. — Phys. Rev. Ser. A, 1976, v. 14, p. 1009.
21. Гайлитис М. К. — В кн. Атомные столкновения. — Рига: Изд-во Латв. ун-та, 1963. — с. 87.
22. Jacobs A. — J. Quantit. Spectr. and Rad. Transfer, 1971, v. 11, p. 143.
23. Tully J. A. — Can. J. Phys., 1973, v. 51, p. 2047.
24. Golden L. B., Sampson D. H. — Astrophys. J., 1971, v. 170, p. 181.
25. Baluja K. L., McDowell M. R. C. — J. Phys. Ser. B, 1977, v. 10, p. 673.

26. McDowell M. R. C., Morgan L. A., Myerscough V. P., Scott T.—*Ibid.*, p. 2727.
27. Bransden B. H., Noble C. J.—*Ibid.*, 1976, v. 9, p. 1509.
28. Dolder K. T., Peart B.—*Ibid.*, 1973, v. 6, p. 2415.
29. Hayes M. A., Seaton M. J.—*Ibid.*, 1977, v. 10, p. 2573.
30. Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами.— М.: ИЛ, 1952.
31. Bely O.—*Proc. Phys. Soc.*, 1966, v. 88, p. 587.
32. Hayes M. A., Seaton M. J.—*J. Phys. Ser. B*, 1978, v. 11, p. 79.
33. Rudge M. R. H., Schwartz S. B.—*Proc. Phys. Soc.*, 1966, v. 88, p. 563.
34. Golden L. B., Sampson D. H.—*J. Phys. Ser. B*, 1977, v. 10, p. 2229.
35. Salop A.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1976, v. 14, p. 2095.
36. Донец Е. Д., Пикин А. И.—*ЖТФ*, 1975, т. 45, с. 2373.
37. Донец Е. Д., Пикин А. И.—*ЖЭТФ*, 1976, т. 70, с. 2025.
38. Донец Е. Д., Овсянников В. П.—Препринт ОИЯИ Р7-10780.— Дубна, 1977.
39. Redhead P. A.—*Can. J. Phys.*, 1967, v. 45, p. 1791.
40. Hasted J. B., Awald G. L.—*J. Phys. Ser. B*, 1972, v. 5, p. 1719.
41. Янке Е., Эмде Ф., Лёш Ф. Специальные функции.— М.: ИЛ, 1964.
42. Иванова Е. Р., Сафронова У. И.—*J. Phys. Ser. B*, 1975, v. 8, p. 1591.
43. Blanchard P.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1976, v. 13, p. 1698.
44. Ivanov L. N., Ivanova E. P., Safronova U. I.—*J. Quantit. Spectr. and Rad. Transfer*, 1975, v. 15, p. 553.
45. Accad Y., Pekeris C. L., Schiff B.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1971, v. 4, p. 516; 1975, v. 11, p. 1479.
46. Moore C. E. Ionization Potential and Ionization Limit: NSRDS-NBS, 34.— Washington, 1970.
47. Lotz W.—*J. Opt. Soc. Amer.*, 1967, v. 57, p. 873.
48. Reader J., Sugar J.—*J. Phys. Chem. and Ref. Data*, 1975, v. 4, p. 353.
49. Onello J. S., Ford L., Dalgarno A.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1974, v. 10, p. 9.
50. Onello J. S.—*Ibid.*, 1975, v. 11, p. 743.
51. Watson D. K., O'Neil S. V.—*Ibid.*, 1975, v. 12, p. 729.
52. Alder K., Bohr A., Huns T., Mottelson B., Winter A.—*Rev. Mod. Phys.*, 1956, v. 28, p. 432.
53. Гервице В. И. Автореферат канд. диссертации.— М.: МИФИ, 1976.
54. Bely O.—*Proc. Phys. Soc.*, 1966, v. 88, p. 587.
55. Burke P. G., Tait J. H., Lewis B. E.—*Ibid.*, 1966, v. 87, p. 209.
56. Hayes M. A., Narcross D. W., Mann J. B., Robb W. D.—*J. Phys. Ser. B*, 1977, v. 10, p. 1429.
57. Van Wungaerden W. L., Henry R. J. W.—*Ibid.*, 1976, v. 9, p. 1461.
58. Gan J. N., Henry R. J. W.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1977, v. 16, p. 986.
59. Callaway J., Gan J. N., Henry R. J. W., Oza D. H., Vo Ky Lan, Le Dourneut.—*Ibid.*, p. 2228.
60. Taylor P. O., Gregory D., Dunn G. H., Phaneuf R. A., Crandall D. H.—*Phys. Rev. Lett.*, 1977, v. 39, p. 1256.
61. Bradbury J. N., Sharp T. E., Mass B., Varney R. N.—*Nucl. Inst. and Meth.*, 1973, v. 110, p. 75.
62. Martin G. A., Wiese W. L.—*Phys. Chem. and Ref. Data*, 1976, 5, p. 537.
63. Pegg D. J., Forester J. P., Vane C. R., Elston S. B., Griffin P. M., Groeneveld K. O., Peterson R. S., Ihoc R. S., Salin J. A.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1977, v. 15, p. 1958.
64. Dietrich D. D., Leavitt J. A., Bashkin S., Canway J. G., Gould H., McDonald D., Marry R., Johnson B. M., Pegg D. J.—*Ibid.*, 1978, v. 18, No. 2.
65. Osterbrock D. E.—*J. Phys. Ser. B*, 1970, v. 3, p. 149.
66. Parks A. D., Sampson D. H.—*Phys. Rev. Ser. A*, 1977, v. 15, p. 1382.
67. Berrington K. A., Burke P. G., Duffton P. L., Kingston A. E.—*J. Phys. Ser. B*, 1977, v. 10, p. 1465.
68. Nakazaki S., Hashino T.—*J. Phys. Soc. Japan*, 1977, v. 43, p. 281.
69. Blaha M., Davis J.—*J. Quantit. Spectr. and Rad. Transfer*, 1978, v. 19, p. 227.
70. Смирнов Б. М., Чибисов М. И.—*TBT*, 1971, т. 9, с. 513.
71. Bhatia A. K., Temkin A.—*J. Phys. Ser. B*, 1977, v. 10, p. 2893.
72. Tully J. A.—*Ibid.*, 1974, v. 7, p. 386.
73. Eissner W., Jones M., Nusbaumer H.—*Comput. Phys. Comm.*, 1974, v. 8, p. 270.
74. Jones M.—*Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, 1974, v. 169, p. 211.

75. Burgess A., Hummer D. G., Tully J. A.— *Phil. Trans. Roy. Soc.*, 1970, v. 266, p. 225.
76. Sampson D. H., Parks A. D., Clark R. E. H.— *Phys. Rev. Ser. A*, 1978, v. 17, p. 1619.
77. Nakazaki S.— *J. Phys. Soc. Japan*, 1976, v. 41, p. 2084.
78. Elton R. C., Köppendorfer W. W.— *Phys. Rev.*, 1967, v. 160, p. 194.
79. Гаулитис М.— *ЖЭТФ*, 1963, т. 17, с. 1328.
80. Parks A. D., Sampson D. H.— *Phys. Rev. Ser. A*, 1977, v. 15, p. 1382.
81. Salop A.— *Ibid.*, 1976, v. 14, p. 2095.
82. Moores D. L.— *J. Phys. Ser. B*, 1978, v. 11, p. 403.
83. Jones L. A., Kalue E., Thomson D. B.— *Ibid.*, 1977, v. 10, p. 187.
84. Kalue E., Jones L. A.— *Ibid.*, p. 3637.
85. Rudge M. R. H., Schwartz S. B.— *Proc. Phys. Soc.*, 1966, v. 88, p. 579.
86. Golden L. B., Sampson D. H., Omidvar K.— *J. Phys. Ser. B*, 1978, v. 11, p. 3235.
87. Lotz W.— *Zs. Phys.*, 1968, Bd. 216, S. 241.
88. Друкарев Г. Ф. Теория столкновении электронов с атомами.— М., Наука, 1963; Столкновения электронов с атомами и молекулами. М.: Наука, 1978.
89. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновении. М.: Мир, 1969.
90. Shevelko V. P., Urnov A. M., Vinogradov A. V.— *J. Phys. Ser. B*, 1979, v. 9, p. 2859.
91. Moores D. L., Golden L. B., Sampson D. H.— *Ibid.*, 1980, v. 13, p. 385.
92. Bely O.— *Ibid.*, 1968, v. 1, p. 23.
93. Hahn Y.— *Phys. Rev. Ser. A*, 1978, v. 18, p. 1028.
94. Cowan R. D., Mann J. B.— *Astrophys. J.*, 1979, v. 232, p. 940.
95. Crandall D. H., Phaneuf R. A., Hasselquist B. E., Gregory D. C.— *J. Phys. Ser. B*, 1979, v. 12, p. L249.
96. Henry R. J. W.— *Ibid.*, p. L309.