

УДК 539.184.5

СКОРОСТИ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ РИДБЕРГОВСКИМИ СОСТОЯНИЯМИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ С ЭЛЕКТРОНАМИ В КУЛОН-БОРНОВСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

И. Л. Бейгман, С. А. Чернягин

Получены аппроксимационные формулы для скоростей переходов между высоковозбужденными состояниями многозарядных ионов при столкновениях с электронами в кулон-борновском приближении. Показано, что при малых температурах скорости переходов в кулон-борновском приближении существенно превосходят борновские.

Скорости переходов между высоковозбужденными состояниями атомов и ионов представляют интерес с точки зрения приложений к задачам кинетики горячей лабораторной и астрофизической плазмы. В силу того, что ридберговские состояния являются вырожденными по угловому квантовому числу, то наибольший интерес представляют скорости переходов $n-n'$, усредненные по угловым квантовым числам. Именно скорости таких переходов являются предметом данной работы.

В борновском приближении аппроксимационные формулы для скоростей $n-n'$ переходов были получены в [1] (см. также обзор [2]). Но борновское приближение не учитывает эффекты влияния дальнедействующего кулоновского поля ридберговского иона на налетающий электрон, и применимо только для больших энергий столкновений $E > E_n$. При исследовании столкновений многозарядных ионов с электронами борновское приближение существенно занижает сечения переходов при малых энергиях столкновения и, как следствие, дает неправильные результаты для скоростей переходов при малых температурах. Наиболее адекватным методом исследования столкновений многозарядных ионов с электронами является кулон-борновское приближение, непосредственно учитывающее эффекты дальнедействующего кулоновского взаимодействия многозарядного иона с налетающим электроном. Однако прямое использование кулон-борновского приближения

для переходов между высоковозбужденными состояниями встречается с вычислительными трудностями, которые чрезвычайно резко растут с ростом главного квантового числа. Методы, предложенные в [3, 4], позволяют преодолеть эти трудности и получить аппроксимационные формулы для сечений $n-n'$ переходов в многозарядных ионах при столкновениях с электронами в кулон-борновском приближении.

В настоящей работе на основании формул для сечений, приведенных в [3, 4], получено выражение для скоростей переходов между высоковозбужденными состояниями многозарядных ионов при столкновениях с электронами в кулон-борновском приближении. В качестве иллюстрации приведено сравнение скоростей для переходов 20–21, 20–24 в кулон-борновском приближении для различных значений заряда ридберговского иона с борновскими расчетами.

Борновское и кулон-борновское приближения. Полный гамильтониан системы ион+внешний электрон имеет вид

$$H = H_a + \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} + T_e - \frac{Ze^2}{R}, \quad (1)$$

где H_a – полный гамильтониан атома, \mathbf{R} – радиус-вектор внешнего электрона, \mathbf{r} – радиус-вектор ридберговского электрона. $T_e = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ – оператор кинетической энергии внешнего электрона, m – масса электрона, Z – спектроскопический символ ридберговского иона.

В борновском приближении в качестве возмущения рассматривается взаимодействие

$$V_b = \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} - \frac{Ze^2}{R}. \quad (2)$$

В этом случае сечение перехода $n-n'$ имеет вид

$$\sigma_{nn'}^b = \frac{m^2}{4\pi^2 \hbar^4} \frac{k'}{k} \frac{1}{n^2} \int d\Omega \sum_{l,m,l',m'} \left| \int e^{-iqR} \varphi_{nlm}(\mathbf{r}) V_b \varphi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) d\mathbf{R} d\mathbf{r} \right|^2, \quad (3)$$

где \mathbf{k}, \mathbf{k}' – волновые векторы налетающего электрона до и после взаимодействия; $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$, $\varphi_{nlm}(\mathbf{r}), \varphi_{n'l'm'}(\mathbf{r})$ – волновые функции ридберговского электрона в начальном и конечном состояниях.

В борновском приближении можно выполнить интегрирование по координатам внешнего электрона. Тогда

$$\sigma_{nn'}^b = \frac{8\pi}{k^2} \frac{1}{n^2} \sum_{l,m,l',m'} \int_{q-}^{q+} |\langle nlm | e^{-iqr} | n'l'm' \rangle|^2 \frac{dq}{q^3}, \quad q_{\pm} = k \pm k'. \quad (4)$$

В кулон-борновском приближении в качестве возмущения рассматривается взаимодействие

$$V_c = \frac{e^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} - \frac{e^2}{R}. \quad (5)$$

Сечение возбуждения имеет вид

$$\sigma_{nn'}^c = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4} \frac{k'}{n^2} \frac{1}{n^2} \sum_{l,m,l',m'} \left| \int F_k(\mathbf{R}) \varphi_{nlm}(\mathbf{r}) V_c \varphi_{n'l'm'}(\mathbf{r}) F_{k'}(\mathbf{R}) d\mathbf{R} d\mathbf{r} \right|^2 d\Omega_{k'}. \quad (6)$$

Здесь F_k и $F_{k'}$ – собственные волновые функции гамильтониана $H_c = T_e - \frac{(Z-1)e^2}{R}$ с энергиями $E = \hbar k^2/2m$ и $E' = \hbar k'^2/2m$ и нормированные соответственно на плоскую волну e^{-ikR} и $e^{-ik'R}$.

Рассмотрение как борновского, так и кулон-борновского приближения возможно в двух представлениях: в представлении переданного импульса и в представлении параметра удара, основанном на классическом описании внешнего электрона.

В рамках борновской теории возмущений в представлении переданного импульса сечение перехода $n - n'$ в H -подобном ионе со спектроскопическим символом Z при столкновениях с электронами имеет вид

$$\sigma_{nn'} = \frac{8\pi}{k^2} \frac{1}{n^2} \int_{k-k'}^{k+k'} \frac{dq}{q^3} f_{nn'}(q). \quad (7)$$

Для переходов между высоковозбужденными уровнями интересны величины сечений, просуммированные по орбитальному моменту l (т.к. уровни с одинаковым главным квантовым числом n в ридберговских состояниях являются "почти" вырожденными по орбитальному квантовому числу l). Суммирование по угловым квантовым числам в формуле (7) может быть выполнено в явном виде. Систематические расчеты борновских сечений приведены, например, в [1]. Они могут быть описаны аппроксимационной формулой

$$\begin{aligned} \sigma_b = & \frac{\pi a_0^2}{Z^4} \frac{1}{n^2} \left(\frac{Z^2 Ry}{E_s} \right) 8 \left\{ \left(1 - \frac{1}{4\Delta n} \right) \frac{(\epsilon\epsilon')^{3/2}}{(\Delta\epsilon)^4} \ln \left(1 + \frac{E}{E_n} \right) + \right. \\ & \left. + (1 + 0,6/\Delta n) \left(\frac{E}{E_n} \right) \frac{1}{(1 + E/E_n)} \frac{(\epsilon')^{3/2}}{(\Delta\epsilon)^2} [4/|3\Delta\epsilon| + 1/\epsilon] \right\}, \\ & \epsilon = 1/n^2; \epsilon' = 1/(n')^2; \Delta\epsilon = \epsilon - \epsilon'; \Delta\epsilon > 0, E_n = \epsilon Ry. \end{aligned} \quad (8)$$

Это выражение для сечения позволяет получить свертку с максвелловским распределением для скорости возбуждения $\langle v\sigma \rangle$.

$$\begin{aligned} \langle v\sigma \rangle = & \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\pi a_0^2}{Z^4} \left(\frac{kT}{Z^2 Ry} \right)^{-1/2} \frac{8}{n^2} \exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right) \times \\ & \times \left\{ \left(1 - \frac{0,25}{\Delta n}\right) \frac{\epsilon \epsilon'}{(\Delta \epsilon)^4} \left[\varphi\left(\frac{E_n}{kT} \left(1 + 0,5 \left(\frac{Z-1}{Z}\right)^2\right)\right) \right] + \right. \\ & \left. + \left(1 - \frac{0,6}{\Delta n}\right) \frac{(\epsilon')^{3/2}}{(\Delta \epsilon)^2} \left(\frac{4}{3\Delta \epsilon} + \frac{1}{\epsilon}\right) \left[1 - \frac{E_n}{kT} \varphi\left(\frac{E_n}{kT}\right)\right] \right\} \\ \varphi(x) = & -e^x Ei(-x), \varphi(x) \approx \ln \left[1 + \frac{1 + 1,4\gamma x}{\gamma x(1 + 1,4x)} \right], \gamma = 1,78. \end{aligned} \quad (9)$$

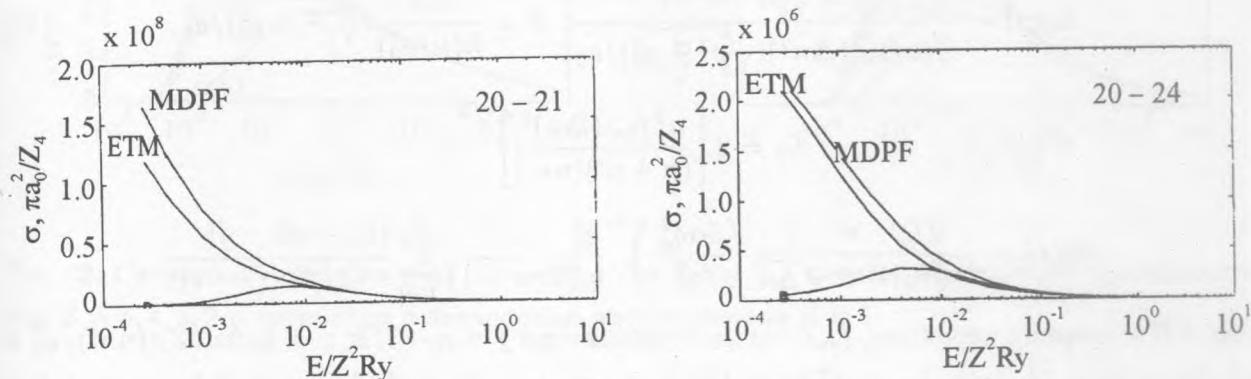


Рис. 1. Сечения переходов $n-n'$ $20 \rightarrow 20 + \Delta n$; $\Delta n = 1,4$. *ETM* – метод эффективных траекторий, *MDPF* – метод искаженного потока частиц. *B* – борновские сечения.

В кулон-борновском приближении невозможно аналитически произвести интегрирование по координатам налетающего электрона. Поэтому для получения сечений переходов с учетом кулоновского взаимодействия налетающего электрона с многозарядным ионом предлагаются различные приближенные методы (см., например, [3, 4, 6, 7]). В работе [3] предложены два метода: метод эффективных траекторий и метод искаженного потока частиц, позволяющие получить сечения переходов между высоковозбужденными состояниями многозарядных ионов при столкновениях с электронами в кулон-борновском приближении. Идея метода эффективных траекторий состоит в замене реальной гиперболической траектории налетающего электрона прямолинейной траекторией с эффективным ударным параметром $\rho_{эфф}$, соответствующим моменту максимального сближения и соответствующей скоростью $v_{эфф}$. При этом

$$\rho_{eff} = \sqrt{\frac{z^4 e^4}{m^2 v_\infty^4} + \rho^2 - \frac{z^2 e^2}{m v_\infty^2}}; \quad v_{eff} = \sqrt{v_\infty^2 - \frac{\Delta E}{m} + \frac{2ze^2}{m\rho_{eff}}}, \quad (10)$$

$$\sigma_{nn'} = 2\pi \int_0^\infty W_{nn'}(\rho) \rho d\rho, \quad (11)$$

где выражение для борновской вероятности перехода было получено в [6] с помощью двумерного Фурье-преобразования из амплитуды перехода в импульсном представлении.

$$W_{nn'} = A_d^2 + A_i^2, \quad (12)$$

$$A_d(\rho) = \frac{L_d \sqrt{1 + \pi\beta} e^{-\beta} n^{1/2} n'^{3/2}}{Z(\nu/\nu_0)(\Delta n^2)(\sqrt{\rho^2 + \rho_0^2})/a_0}, \quad \beta = \frac{\Delta E}{\hbar(\nu/\nu_0)}(\sqrt{\rho^2 + \rho_0^2})/a_0,$$

$$L_d = 2 \left[\frac{n^2 f_{nn'} (\Delta n)^3}{(n + n')(nn')} \right]^{1/2};$$

$$A_i(r) = \frac{2f_0}{(\nu/\nu_0)Z} \frac{n'}{n} \frac{1}{\sqrt{\Delta n}} \left(\frac{2\alpha q_m^2}{q_0^2} \right)^\alpha \frac{q_0^2}{q_m} \frac{e^{-y}}{2(\alpha - 1)} \sum_{i=0}^j \frac{(2j - i)!}{(2j)!} \frac{j!}{(j - i)!},$$

где ΔE – энергия перехода, $f_{nn'}$ – сила осциллятора $j = \alpha - 3/2$; $y = q_0 \Delta n (Z\rho/nn')$; $q_0^2 = q_m^2(2\alpha - 1) + (k_0/\nu)^2$; $k_0 = (1/n + 1/n')$; $q_m = 1, 1$; $f_0 = 0, 33$; $\alpha = 3, 5$; $\rho_0 = 1, 2 \times (nn'/Z)a_0$; $\nu_0 = \sqrt{Ry}/m$, a_0, ν_0 – боровские радиус и скорость соответственно, Ry – единица ридберга для энергии.

Если использовать приближение Крамерса для силы осциллятора, то $L_d = 0, 7$ для $\Delta n = 1$. Более точные формулы дают $L_d = 0, 6$.

Метод искаженного потока частиц [3] основан на феноменологическом учете явлений "фокусировки" и ускорения потока налетающих электронов кулоновским полем ридберговского иона. Этот метод дает следующее выражение для сечения перехода:

$$\sigma_{mdpf} = \left(1 + \frac{(Z - 1)^2 Ry}{E_{nn'}} \right) \frac{\pi a_0^2}{Z^4} \frac{1}{n^2} \left(\frac{Z^2 Ry}{E_s} \right) 8 \cdot \left\{ \left(1 - \frac{1}{4\Delta n} \right) \frac{(\epsilon\epsilon')^{3/2}}{(\Delta\epsilon)^4} \ln \left(1 + \frac{E_s}{E_n} \right) + \right. \quad (13)$$

$$\left. + (1 + 0, 6/\Delta n) \left(\frac{E_s}{E_n} \right) \frac{1}{(1 + E_s/E_n)} \frac{(\epsilon')^{3/2}}{(\Delta\epsilon)^2} [4/|3\Delta\epsilon| + 1/\epsilon] \right\}$$

$$\epsilon = 1/n^2; \quad \epsilon' = 1/(n')^2; \quad \Delta\epsilon = \epsilon - \epsilon'; \quad \Delta\epsilon > 0. \quad E_s = E_i + 3z^2 Ry/nn'.$$

Формула для борновского приближения (8) получается из (13) автоматически, если положить $Z = 1$ ($z = 0$). Сравнение результатов, полученных в рамках этих методов и методов, предложенных в [7, 8] с борновским приближением и прямыми расчетами по программе "АТОМ" [9] для переходов 5-6 и 3-5 приведено на рис. 1. Видно, что наилучшее согласие с прямыми кулон-борновскими расчетами дают метод эффективных траекторий и метод искаженного потока частиц.

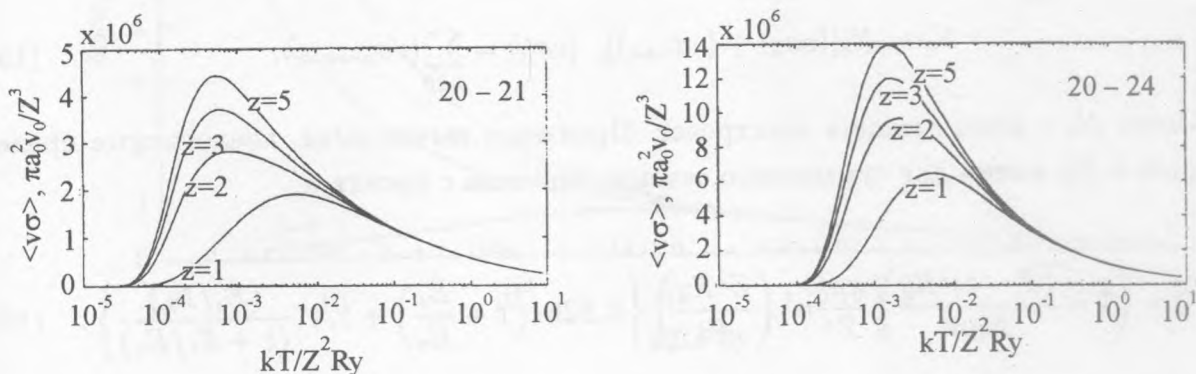


Рис. 2. Скорости переходов $n-n'$ $20 \rightarrow 20 + \Delta n$, $\Delta n = 1, 4$ в кулон-борновском приближении для $Z = 5, 4, 3, 2$ в сравнении с борновским приближением $Z = 1$.

Скорости переходов в кулон-борновском приближении. Выражение для сечения в методе искаженного потока частиц позволяет получить свертку с максвелловским распределением $\langle v\sigma \rangle$. Формула для $\langle v\sigma \rangle$, получаемая в методе искаженного потока частиц, не содержит интегрирований, поэтому она является очень удобной для задач кинетики плазмы высоковозбужденных ионов. Применив метод получения $\langle v\sigma \rangle$, изложенный в [1], имеем

$$\begin{aligned} \langle v\sigma \rangle = & \frac{\pi a_0^2 v_0}{Z^3} \left(\frac{kT}{Z^2 \text{ Ry}} \right)^{-1/2} \frac{8}{n^2} \exp \left(-\frac{\Delta E}{kT} \right) \times \\ & \times \left\{ \left(1 - \frac{0,25}{\Delta n} \right) \frac{\epsilon \epsilon'}{(\Delta \epsilon)^4} \left[\ln \left(1 + 0,5 \left(\frac{Z-1}{Z} \right)^2 \right) + \varphi \left(\frac{E_n}{kT} \left(1 + 0,5 \left(\frac{Z-1}{Z} \right)^2 \right) \right) \right] + \right. \\ & + \left(1 - \frac{0,6}{\Delta n} \right) \frac{(\epsilon')^{3/2}}{(\Delta \epsilon)^2} \left(\frac{4}{3\Delta \epsilon} + \frac{1}{\epsilon} \right) \times \\ & \left. \times \left[1 - \frac{E_n}{kT} \left(1 - 1,5 \left(\frac{Z-1}{Z} \right)^2 \right) \varphi \left(\left(1 + 1,5 \left(\frac{Z-1}{Z} \right)^2 \right) \frac{E_n}{kT} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

Так же как и в формуле для сечений, для скоростей реакций борновское приближение (9) получается из (14) автоматически, если положить $Z = 1$ ($z = 0$).

Сечения уширения ридберговских уровней в кулон-борновском приближении. В работах [9, 10] показано, что штарковское уширение линий $n + k \rightarrow n$ при достаточно больших n определяется неупругими столкновениями возбужденных атомов и ионов с электронами. В соответствии с результатами этих работ штарковская ширина линии $n + k \rightarrow n$ определяется выражением

$$\delta\omega = N_e[\langle v\sigma_n \rangle + \langle v\sigma_{n+k} \rangle], \quad \langle v\sigma_n \rangle = \sum_{k \neq 0} \langle v\sigma_{n \rightarrow n+k} \rangle. \quad (15)$$

Здесь N_e – концентрация электронов. Производя вычисления, аналогичные приведенным в [6], имеем для суммарного сечения перехода с уровня n :

$$\sigma_n = \left(1 + \frac{(Z-1)^2 Ry}{Enn'}\right) \frac{\pi a_0^2}{Z^4} n^4 \left(\frac{Z^2 Ry}{E_s}\right) \left\{0,82 \ln\left(1 + \frac{E_s}{E_n}\right) + 1,47 \frac{(E_s/E_n)}{(1 + E_s/E_n)}\right\}. \quad (16)$$

Здесь $E_s = E + 3Z^2 Ry/nn'$.

Тогда для уширения имеем

$$\begin{aligned} \frac{\delta\omega_{n+k}}{\omega_{n+k}} = & 0,48 \cdot 10^{-24} \frac{(n+k/2)^7}{Z^5} N_e \left(\frac{kT}{Z^2 Ry}\right)^{-1/2} \times \\ & \times \left\{0,82 \left[\ln\left(1 + 0,5 \left(\frac{Z-1}{Z}\right)^2\right) + \varphi\left(\frac{E_n}{kT} \left(1 + 0,5 \left(\frac{Z-1}{Z}\right)^2\right)\right) \right] + \right. \\ & \left. + 1,47 \left[1 - \frac{E_n}{kT} \left(1 - 1,5 \left(\frac{Z-1}{Z}\right)^2\right) \varphi\left(\left(1 + 1,5 \left(\frac{Z-1}{Z}\right)^2\right) \frac{E_n}{kT}\right) \right] \right\}. \quad (17) \end{aligned}$$

На рис. 2 представлены скорости переходов 20-21, 20-24 в кулон-борновском приближении при различных значениях заряда ридберговского иона ($Z = 1$ соответствует борновскому приближению). Видно, что при больших температурах ($kT \gg E_n$) скорости переходов в борновском и кулон-борновском приближениях мало отличаются друг от друга. Максимум скорости перехода в кулон-борновском приближении сдвигается в область малых температур, и в области максимума может превышать борновскую скорость более чем в 2-3 раза. Следует отметить, что хотя вероятность переходов с $\Delta n = 1$, как и в борновском приближении, значительно больше, чем переходов с $\Delta n \gg 1$, как видно из рис. 2, их зависимость от энергии качественно очень похожи. Однако при малых

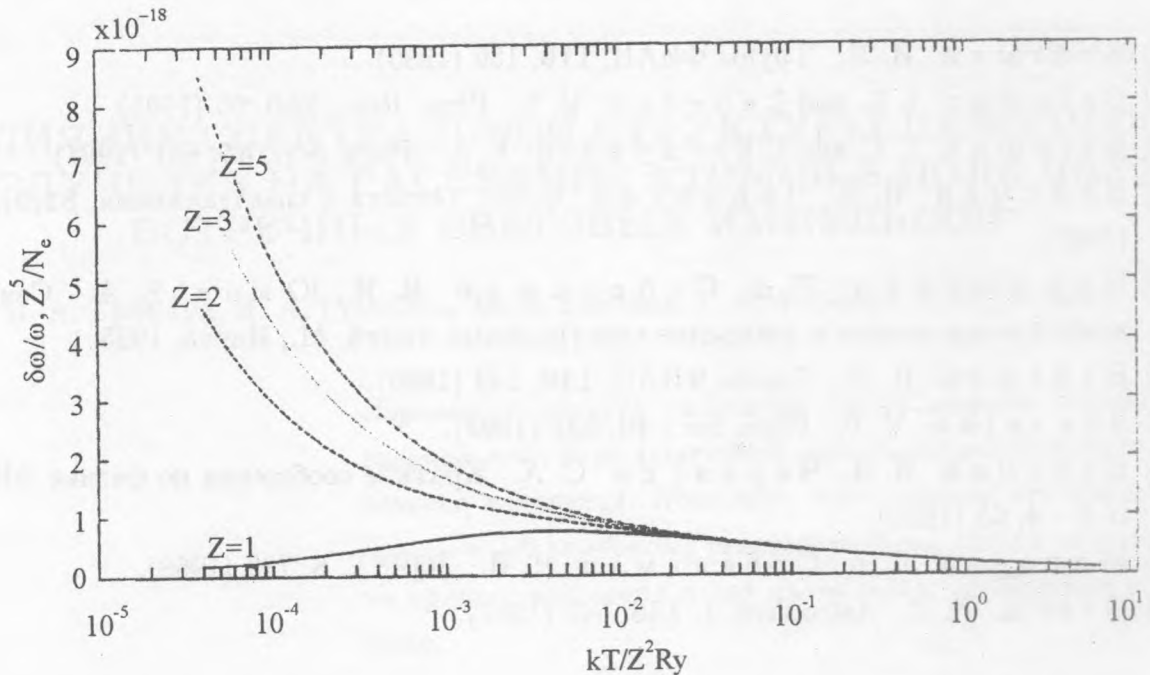


Рис. 3. Относительная ширина $\delta\omega/\omega$ линии $20 \rightarrow 21$ в кулон-борновском приближении для $Z = 5, 4, 3, 2$ в сравнении с борновским приближением $Z = 1$.

температурах ($kT \ll Z^2 Ry$) борновское приближение существенно занижает результаты. Таким образом, учет кулоновского взаимодействия между ридберговским ионам и налетающим электроном является необходимым для расчетов скоростей переходов при малых температурах.

На рис. 3 приведено относительное уширение в кулон-борновском приближении при различных значениях заряда ридберговского иона ($Z = 1$ соответствует борновскому приближению) для $n = 20$. Так же как и в случае скоростей переходов, кулон-борновская ширина линии существенно превосходит борновскую при малых температурах ($kT \ll E_n$).

Эта работа частично поддержана Международным научно-техническим центром (грант N 076-95) и Российским фондом фундаментальных исследований (проекты N 95-02-05928, N 97-02-16090, N 97-02-16919), а также совместным грантом РФФИ-ИНТАС-95-IN-RU-875.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Бейгман И. Л. Труды ФИАН, **119**, 130 (1980).
- [2] Beigman I. L. and Lebedev V. S. Phys. Rep., **250**, 95 (1995).
- [3] Beigman I. L. and Chernyagin S. A. Phys. Scr., **55**, 661 (1997).
- [4] Бейгман И. Л., Чернягин С. А. Оптика и спектроскопия, **82**(5), 742 (1997).
- [5] Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Сечения возбуждения атомов и уширение спектральных линий. М., Наука, 1995.
- [6] Бейгман И. Л. Труды ФИАН, **119**, 143 (1980).
- [7] Shevelko V. P. Phys. Scr., **46**, 531 (1992).
- [8] Бейгман И. Л., Чернягин С. А. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 3 - 4, 65 (1994).
- [9] Минаева Л. А., Собельман И. И. JQRST, **8**, 783 (1968).
- [10] Griem H. P. Astrophys. J. **148**, 547 (1967).

Поступила в редакцию 18 декабря 1997 г.