

УДК 539.184.5

О РАСЧЕТЕ СЕЧЕНИЙ ВОЗБУЖДЕНИЯ В АТОМАХ И ИОНАХ МЕТОДОМ ПАРАМЕТРА СТОЛКНОВЕНИЯ

И. Л. Бейгман, Д. В. Бородин¹, Л. А. Вайнштейн

Приведены общие формулы для борновских и кулон-борновских сечений переходов в атомах и ионах в рамках приближения параметра столкновения на основе реального атомного потенциала. В качестве иллюстрации приводятся сечения переходов $4^1S - 4^1P$, $4^3S - 4^3P$, $4^3S - 4^3D$, $4^3D - 4^3F$ в He и для перехода $2S_{1/2} - 2P_{3/2}$ в ионе ArXVIII. Результаты вычислений в рамках приближения параметра столкновения сравниваются с данными, полученными чисто квантовыми методами в рамках q -представления и представления парциальных волн. Демонстрируется существенная роль нормировки.

Расчет скоростей и сечений переходов между близкими состояниями в атомах и ионах при соударениях с тяжелыми заряженными частицами имеет большое значение для диагностики горячей плазмы.

Для расчетов этих сечений можно использовать чисто квантовые методы [1]. В ряде случаев достаточно применить первый порядок теории возмущений в рамках q -представления или представления парциальных волн. Расчеты в q -представлении значительно проще, т.к. метод парциальных волн неизбежно включает двойное суммирование по орбитальным квантовым числам налетающей и рассеянной частиц. Вместе с тем преимуществом метода парциальных волн является возможность нормировки и учета кулоновского взаимодействия иона с налетающей частицей.

¹Московский физико-технический институт.

С ростом массы частицы растут величины орбитальных моментов, дающих основной вклад в сечение. Поэтому, для расчета сечений при соударениях с тяжелыми частицами приходится учитывать вклад большого количества парциальных волн. Волновые функции налетающей частицы в центре атома пропорциональны r в степени орбитального момента l частицы. При столкновениях, например, с протонами необходимо рассматривать значения орбитального момента, достигающие и превосходящие 1000. Это является причиной значительных трудностей при проведении численных расчетов.

В настоящей работе приведены общие выражения для амплитуд и сечений перехода в рамках метода параметра столкновения, свободного от этих трудностей, на основе реального (численного) потенциала. Этот метод предполагает, что налетающая частица движется по классической траектории. В дополнение к этому в настоящей статье внешняя заряженная частица предполагается бесструктурной, а ее траектория прямой или гиперболической.

В рамках метода параметра столкновения реализована процедура нормировки как на один канал, так и на все возможные. В статье приведено сравнение результатов, полученных разными методами.

В качестве примера приведены значения сечений, вычисленные для переходов $4^1S - 4^1P$, $4^3S - 4^3P$, $4^3S - 4^3D$, $4^3D - 4^3F$ в гелии и для перехода $2S_{1/2} - 2P_{3/2}$ в ионе $ArXVIII$. Результаты вычислений, полученных в рамках приближения параметра столкновения, сравниваются с данными, полученными ранее чисто квантовыми методами в рамках q -представления и представления парциальных волн.

В настоящей статье метод параметра столкновения предполагается использовать для расчета сечений переходов при столкновениях с тяжелыми частицами. Его использование для столкновений с электронами также возможно, но при этом обменная часть взаимодействия не учитывается.

Все вычисления проводились с помощью программы "АТИРМ", которая является дополнением к программе [1]. Потенциал взаимодействия и угловые множители вычислялись программой "АТОМ".

Все формулы приведены в атомной системе единиц с единицей Ry для энергии и πa_0^2 для сечения.

Основные формулы

Представление параметра столкновения. Приближение параметра столкновения состоит в том, что предполагается, что налетающая частица движется по классической

траектории, при этом атом рассматривается как квантовая система. В дальнейшем также предполагается, что частица является точечным зарядом, т.е. мы пренебрегаем структурой частицы. Это, например, применимо для электронов или протонов. Сечение перехода $0 \rightarrow 1$ в атоме можно написать как

$$\sigma(v) = 2\pi \int_0^{\infty} W_{10}(\rho, v) \cdot d\rho, \quad (1)$$

где W_{10} – вероятность перехода, ρ – прицельный параметр, а v – скорость частицы.

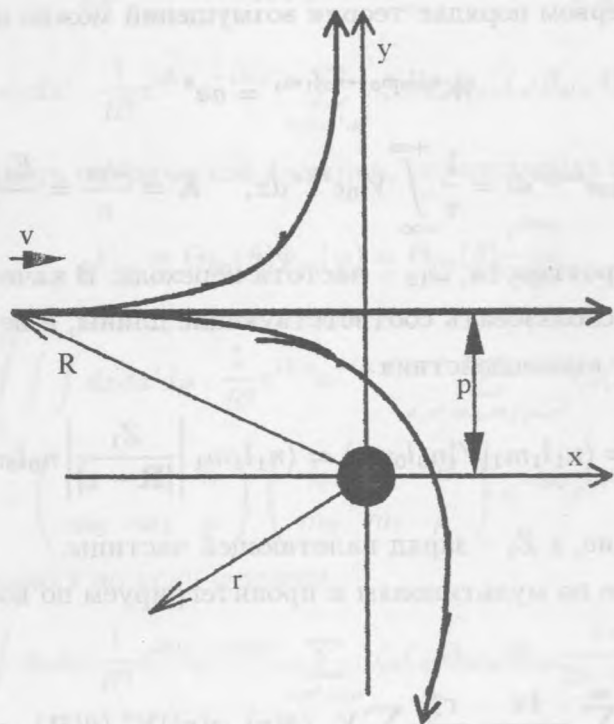


Рис. 1. Траектории движения заряженной частицы в поле атома или иона.

В первом порядке теории возмущений вероятность столкновительного перехода в атоме в приближении параметра столкновения выглядит как

$$W_{10}^B = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} V_{10}(\mathbf{R}(t)) \exp(i\omega_{10}t) dt \right|^2. \quad (2)$$

Это общее выражение для борновской вероятности без учета конкретной формы траектории. Здесь ω_{10} – частота перехода, $V_{10}(t)$ – возмущение, определяемое кулоновским

взаимодействием атома с налетающей заряженной частицей. Оно зависит от положения частицы $\mathbf{R}(t)$ и ее скорости $\mathbf{v}(t)$. Радиус-вектор атомного электрона, который нам понадобится при интегрировании Ψ -функций, будем обозначать как \mathbf{r} (см. рис. 1).

Прямолинейная траектория. Рассмотрим движение частицы по прямолинейной траектории с постоянной скоростью. Тогда зависимость координаты от времени будет иметь вид

$$\mathbf{R} = \vec{\rho} + \mathbf{v}t \Rightarrow R^2 = \rho^2 + x^2,$$

где ρ – параметр столкновения, $x = vt$.

Рассмотрим сначала переходы в одноэлектронном атоме. Тогда вероятность перехода $n_0 l_0 m_0 \rightarrow n_1 l_1 m_1$ в первом порядке теории возмущений можно написать в виде

$$W^{n_0 l_0 m_0 \rightarrow n_1 l_1 m_1} = a a^*$$

$$a = \int_{-\infty}^{+\infty} V_{10} e^{i\omega_{10}t} dt = \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{10} e^{iKx} dx, \quad K = \frac{\omega_{10}}{v} = \frac{E_1 - E_0}{2v}. \quad (3)$$

Здесь a – амплитуда вероятности, ω_{10} – частота перехода. В качестве переменных интегрирования удобнее использовать соответствующие длины, а не время.

Матричный элемент взаимодействия

$$V_{10}(t) = \langle n_1 l_1 m_1 | V | n_0 l_0 m_0 \rangle = \langle n_1 l_1 m_1 | \left| \frac{Z_1}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}|} \right| n_0 l_0 m_0 \rangle. \quad (4)$$

Здесь V – взаимодействие, а Z_1 – заряд налетающей частицы.

Проведем разложение по мультиполям и проинтегрируем по координатам атомного электрона. Тогда

$$V = Z_1 \sum_{\kappa=0}^{\infty} \frac{4\pi}{2\kappa+1} \frac{r_{<}^{\kappa}}{r_{>}^{\kappa+1}} \sum_{\mu} Y_{\kappa\mu}(\theta(\mathbf{r}), \varphi(\mathbf{r})) Y_{\kappa\mu}^*(\theta(\mathbf{R}), \varphi(\mathbf{R})) \quad (5)$$

$$V_{10} = \sum_{\kappa,\mu} \frac{\zeta_{\kappa}(R) \beta_{\kappa\mu} Y_{\kappa\mu}^*(R)}{R}, \quad (6)$$

где

$$\zeta_{\kappa}(R) = Z_1 \cdot (2l_0 + 1)(2l_1 + 1) \cdot R \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{R}_{n_0 l_0}^* \mathcal{R}_{n_1 l_1} \frac{r_{<}^{\kappa}}{r_{>}^{\kappa+1}} \begin{pmatrix} l_0 & l_1 & \kappa \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot r^2 dr \quad (7)$$

$$\beta_{\kappa\mu} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\kappa+1}} \begin{pmatrix} l_0 & l_1 & \kappa \\ m_0 & m_1 & \mu \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Здесь κ – первый индекс суммирования, имеющий смысл мультипольности, а μ – второй индекс суммирования, \mathcal{R}_{nl} , Y_{lm} – радиальные и угловые части атомных волновых функций соответственно.

Чтобы получить выражение для вероятности перехода $n_0 l_0 \rightarrow n_1 l_1$, необходимо провести суммирование по конечным состояниям m_1 и усреднение по начальным состояниям m_0

$$W^1 = \frac{1}{g_0} \sum_{m_0, m_1} W^{n_0 l_0 m_0 \rightarrow n_1 l_1 m_1} = \frac{1}{2l_0 + 1} \sum_{m_0, m_1} W^{n_0 l_0 m_0 \rightarrow n_1 l_1 m_1} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} g_0 W^1 &= \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot e^{-iKx} \sum_{\kappa, \mu} \zeta_{\kappa} \beta_{\kappa\mu} \Theta_{\kappa\mu} \frac{e^{-i\mu\varphi}}{R\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \cdot e^{iKx'} \sum_{\kappa', \mu'} \zeta_{\kappa'} \beta_{\kappa'\mu'} \Theta_{\kappa'\mu'} \frac{e^{i\mu'\varphi}}{R\sqrt{2\pi}} = \\ &= \frac{1}{2\pi v^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dx' \cdot \frac{1}{R^2} e^{iKx} e^{-iKx'} \sum_{\kappa, \mu, \kappa', \mu'} \zeta_{\kappa} \beta_{\kappa\mu} \Theta_{\kappa\mu} \zeta_{\kappa'} \beta_{\kappa'\mu'} \Theta_{\kappa'\mu'} \delta_{\mu\mu'} \cdot e^{-i\mu\varphi} e^{i\mu'\varphi} \end{aligned}$$

Θ_{lm} – орбитальная часть сферической функции, определяемая формулой

$$Y_{lm} = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (10)$$

$$\begin{aligned} g_0 W^1 &= \frac{1}{2\pi v^2} \int_0^{2\pi} \int \int dx dx' d\varphi \cdot \frac{1}{R^2} e^{iKx} e^{-iKx'} \sum_{\kappa, \kappa', m_0, m_1, \mu, \mu'} \zeta_{\kappa} \zeta_{\kappa'} \Theta_{\kappa'\mu'} \Theta_{\kappa\mu} \frac{4\pi}{2\kappa + 1} \times \\ &\times \begin{pmatrix} l_0 & l_1 & \kappa \\ m_0 & m_1 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_0 & l_1 & \kappa' \\ m_0 & m_1 & \mu' \end{pmatrix} e^{-i\mu\varphi} e^{i\mu'\varphi} d\varphi. \end{aligned} \quad (11)$$

После интегрирования по углу φ имеем

$$\begin{aligned} g_0 W^1 &= \frac{1}{v^2} \int \int dx dx' \frac{1}{R^2} e^{iKx} e^{-iKx'} \sum_{\kappa, \kappa', \mu, \mu'} \zeta_{\kappa} \zeta_{\kappa'} \Theta_{\kappa'\mu'} \Theta_{\kappa\mu} \frac{4\pi}{2\kappa + 1} \sum_{\kappa, \kappa'} \frac{1}{2\kappa + 1} \delta_{\mu\mu'} = \\ &= \frac{1}{v^2} \sum_{\kappa} \frac{4\pi}{(2\kappa + 1)^2} \times \begin{cases} \int \int \frac{\zeta_{\kappa}(x) \zeta_{\kappa'}(x')}{R^2} \left(\sum_{\mu=2n} \Theta_{\kappa\mu}(x) \Theta_{\kappa\mu}(x') \cdot \cos(Kx) \cos(Kx') + \right. \\ \left. + \sum_{\mu=2n+1} \Theta_{\kappa\mu}(x) \Theta_{\kappa\mu}(x') \sin(Kx) \sin(Kx') \right) dx dx', \\ \kappa = 2n_1 \\ \int \int \frac{\zeta_{\kappa}(x) \zeta_{\kappa'}(x')}{R^2} \left(\sum_{\mu=2n} \Theta_{\kappa\mu}(x) \Theta_{\kappa\mu}(x') \cdot \sin(Kx) \sin(Kx') + \right. \\ \left. + \sum_{\mu=2n+1} \Theta_{\kappa\mu}(x) \Theta_{\kappa\mu}(x') \cos(Kx) \cos(Kx') \right) dx dx', \\ \kappa = 2n_1 + 1 \end{cases} \quad (12) \end{aligned}$$

(n_1 – неотрицательное целое).

Вводя функции

$$\text{Cos}K(x, \kappa) = \begin{cases} \cos(x), & \kappa = 2n_1 \\ \sin(x), & \kappa = 2n_1 + 1 \end{cases}, \quad \text{Sin}K(x, \kappa) = \begin{cases} \sin(x), & \kappa = 2n_1 \\ \cos(x), & \kappa = 2n_1 + 1 \end{cases} \quad (13)$$

и используя свойства четности подынтегральных выражений, получаем

$$g_0 W^1 = \frac{2\pi}{v^2} \sum_{\kappa} \frac{2}{(2\kappa + 1)^2} \cdot \left(\sum_{\mu=2n}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\zeta_{\kappa}(x)}{R} \Theta_{\kappa\mu}(x) \text{Cos}K(Kx, \kappa) dx \right)^2 (4 - 2\delta_{\mu 0}) + \right. \\ \left. + 4 \cdot \sum_{\mu=2n+1}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\zeta_{\kappa}(x)}{R} \Theta_{\kappa\mu}(x) \text{Sin}K(Kx, \kappa) dx \right)^2 \right). \quad (14)$$

Итак, сечение перехода в одноэлектронном атоме в первом порядке теории возмущений и при прямолинейной траектории частицы

$$g_0 \sigma^1 = \sum_{\kappa} \frac{2\pi}{v^2} \int_0^{+\infty} W_{\kappa}^1(\rho) d\rho = \sum_{\kappa} \frac{2\pi}{v^2} \int_0^{+\infty} d\rho \cdot \left(\frac{1}{2\kappa + 1} \right)^2 \times \\ \times \left(4 \sum_{\mu=2n}^{+\infty} \left(\left(\int_0^{+\infty} \frac{\zeta_{\kappa}(x)}{R} \Theta_{\kappa\mu}(x) \text{Cos}K(Kx, \kappa) dx \right)^2 (4 - 2\delta_{\mu 0}) \right) + \right. \\ \left. + 16 \sum_{\mu=2n+1}^{+\infty} \left(\int_0^{+\infty} \frac{\zeta_{\kappa}(x)}{R} \Theta_{\kappa\mu}(x) \text{Sin}K(Kx, \kappa) dx \right)^2 \right). \quad (15)$$

Здесь мы, используя соображения симметрии, перешли от интегралов от минус до плюс бесконечности к интегралам от нуля до бесконечности, а также вынесли сумму по мультиполям из-под интеграла по ρ .

Нормировка. В первом порядке теории возмущений вероятность пропорциональна квадрату взаимодействия и в ряде случаев борновское приближение дает значения вероятности, значительно превышающие 1. С ростом прицельного параметра взаимодействие атома с налетающей частицей, вызывающее переход, уменьшается. Соответственно улучшаются условия применимости теории возмущений. Поэтому имеет смысл рассматривать две зоны: зону $\rho < \rho^*$, в которой теория возмущений неприменима и потому вычисленная в борновском приближении вероятность может превосходить во много раз не только истинное значение, но и 1, и зону $\rho > \rho^*$, в которой теория возмущений дает

значения вероятности, близкие к истинным. Процедура нормировки заключается в том, что мы, практически не меняя значений вероятности во второй зоне, устраняем противоречие определению вероятности значения в первой. Например, можно положить вероятность в первой зоне равной 0, или 1, или еще каким-либо образом ограничить.

Наиболее целесообразно применять процедуру нормировки при расчете сечений переходов, т.к., если отклонения от истинных значений v , пускай небольшой, первой зоне значительны, то она может давать заметный, и даже доминирующий, вклад в сечение, которое является интегралом (1) от вероятности по ρ . Таким образом, процедура нормировки существенно расширяет область применимости теории возмущений.

Определим нормированную вероятность W^{nl} соотношением

$$W_{\gamma_1 \gamma_0}^{nl} = \frac{W_{\gamma_1 \gamma_0}^B}{1 + W_{\gamma_1 \gamma_0}^B}. \quad (16)$$

Здесь W^B – борновская вероятность перехода $\gamma_0 \rightarrow \gamma_1$.

В том случае, когда существенны несколько каналов возбуждения, следует учитывать, что суммарная вероятность также не должна превышать 1, т.е. для многоканальной нормировки необходимо использовать более общую формулу

$$W_{\gamma_1 \gamma_0}^{nl} = \frac{W_{\gamma_1 \gamma_0}^B}{1 + \sum_{\gamma_2} W_{\gamma_2 \gamma_0}^B}. \quad (17)$$

Очевидно, что с уменьшением вероятности перехода, а значит и величины возмущения, эффект нормировки должен уменьшаться. Однако следует отметить, что если существует несколько каналов перехода из данного начального состояния γ_0 , то возможна существенная нормировка "слабого" канала за счет существования "сильного".

Дипольная асимптотика. В случае дипольных переходов – при мультипольности $k = 1$ интегралы (1) и (3) имеют логарифмическую сходимость. Именно в этом случае существует возможность получить аналитические выражения для вероятности при больших параметрах столкновения и вклада этой области в сечение, используя асимптотические выражения.

При больших значениях прицельного параметра можно в формулах для вероятности использовать асимптотическое выражение для матричного элемента потенциала взаимодействия, определяемого формулой (6):

$$V_{01} = \frac{\langle d_{10} \rangle \mathbf{R}}{R^3}, \quad (18)$$

где $\langle \mathbf{d}_{10} \rangle$ – матричный элемент дипольного момента атома.

На основе этого выражения Ситон [2] получил

$$W(\rho) = C \frac{1}{(\rho v)^2} \xi(\beta), \quad \beta = \frac{\omega \rho}{v} = K \rho. \quad (19)$$

$$\xi(\beta) = \beta^2 (K_0^2(\beta) + K_1^2(\beta)). \quad (20)$$

Здесь K_0 и K_1 – функции Макдональда.

С другой стороны,

$$\xi(\beta) = \beta^2 (K_0^2(\beta) + K_1^2(\beta)) \approx (1 + \pi \beta) e^{-2\beta}. \quad (21)$$

Эта приближенная формула дает правильные результаты с точностью до 5%. Ее можно найти, например, в [3].

Выберем минимальное ρ_1 , отвечающее двум условиям: $\rho_1 > a_0 \cdot n_*^2$, $W(\rho_1) < c w$, где n_* – эффективное главное квантовое число, а $c w \ll 1$. Тогда интегрирование вероятности по ρ можно разбить на две зоны:

$$\int_0^{\infty} W(\rho) \rho \cdot d\rho = \int_0^{\rho_1} W(\rho) \rho \cdot d\rho + \int_{\rho_1}^{\infty} W(\rho) \rho \cdot d\rho. \quad (22)$$

Первый интеграл можно вычислять численно, а во второй подставим асимптотическую формулу (21). Константу C получим из условия сшивки.

$$C = W(\rho_1) (\rho_1 v)^2 / \xi(K \rho_1) \quad (23)$$

$$\int_{\rho_1}^{\infty} W(\rho) \rho \cdot d\rho = \frac{1}{v^2} \int_{\rho_1}^{\infty} (1 + \pi K \rho) e^{-2K \cdot \rho} \frac{d\rho}{\rho} = \frac{1}{v^2} (I_1 + I_2) \quad (24)$$

$$I_2 = \pi K \int_{\rho_1}^{\infty} e^{-2K \cdot \rho} d\rho = \frac{\pi}{2} e^{-2K \cdot \rho_1} \quad (25)$$

$$I_1 = \int_{\rho_1}^{\infty} \frac{e^{-2K \cdot \rho}}{\rho} d\rho = \int_{2K \cdot \rho_1}^{\infty} \frac{e^{-x}}{x} dx = -Ei(-2K \rho_1). \quad (26)$$

Для вычисления интегральной экспоненты используем приближенную формулу

$$\varphi(x) = e^{-x} Ei(-x) \approx \ln \left(1 + \frac{1 + 2.49x}{1.78x(1 + 1.4x)} \right). \quad (27)$$

Ее также можно найти в [3].

$$I_1 \approx e^{-2K \cdot \rho_1} \ln \left(1 + \frac{1 + 2.49 \cdot 2K \rho_1}{1.78 \cdot 2K \rho_1 (1 + 14 \cdot 2K \rho_1)} \right). \quad (28)$$

Кулон-борновское приближение. Рассмотрим переходы в многозарядных ионах при столкновениях с медленными заряженными частицами. В этом случае дальнедействующее кулоновское взаимодействие заряда Z_1 налетающей частицы с зарядом $(Z - 1)$ иона может существенно изменить траекторию частицы. Чтобы учесть это взаимодействие в рамках приближения параметра столкновения, необходимо рассмотреть для частицы соответствующую классическую траекторию – гиперболу (см. рис. 1), которая в параметрическом представлении описывается формулами

$$x \rightarrow X = a(\epsilon - \cosh(u)) \quad y \rightarrow Y = a\sqrt{\epsilon^2 - 1} \sinh(u) \quad (29)$$

$$R \rightarrow R_g = a(\epsilon \cdot \cosh(u) - 1)$$

$$a = \frac{Z_1(Z - 1)}{mv_\infty^2} \quad \alpha = Z_1(Z - 1) \quad (30)$$

$$\epsilon = \sqrt{1 + \frac{2EK_p^2}{M}} = \sqrt{1 + M^2 v_\infty^4}, \quad M = \frac{mm_n}{m + m_n}. \quad (31)$$

Здесь M – приведенная масса, m_n – масса ядра, m , K_p – масса и момент налетающей частицы, ϵ – эксцентриситет траектории, X , Y – координаты в системе центра масс, а R – радиус-вектор в той же системе, a – кулоновский фактор, u – параметр. Интеграл вдоль траектории налетающей частицы (в случае прямолинейной траектории (3) интеграл по x) переходит в одномерный интеграл по u :

$$\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{10} e^{iKx} dx \rightarrow \frac{1}{v} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{10} \exp(iK \tilde{x}(u)) du \quad (32)$$

$$\tilde{x} = a(\epsilon \cdot \sinh(u) - u).$$

Эксцентриситет ϵ и кулоновский фактор a связаны законами сохранения:

$$\begin{cases} mpv_\infty = mdv_0 \\ \frac{mv_\infty^2}{2} = \frac{mv_0^2}{2} + \frac{Z_1 \cdot (Z-1)}{d} \end{cases} \quad (33)$$

$$Ed^2 - 2\alpha d - \rho^2 E^2 \Rightarrow d = \frac{\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 4\rho^2 E^2}}{2E}.$$

Расстояние наибольшего сближения

$$d = a(\epsilon - 1). \quad (34)$$

Удобнее пользоваться не эксцентриситетом, а

$$D_\epsilon = a \cdot \epsilon = a - \frac{\alpha - \sqrt{\alpha^2 + \rho^2 E^2}}{E}. \quad (35)$$

(Знак "+" перед корнем исключен, т.к. эксцентриситет гиперболической траектории не может быть меньше 1.)

SL-связь. Чтобы рассматривать многоэлектронный атом, надо предположить какую-либо схему сложения моментов. Наиболее часто используемой является *SL-связь*; в этом приближении атом описывается квантовыми числами L, S, J , представляющими собой орбитальный, спиновый и полный момент атома. Также мы будем пользоваться соответствующими угловыми числами атомного остатка (кора) S_c, L_c и свободного электрона s, l .

Тогда выражение для сечения возбуждения (15) приобретает вид

$$\sigma_m = \sum_{\kappa} \frac{1}{2L_0 + 1} Q_{\kappa} \sigma_{\kappa}^1 = \sum_{\kappa} \frac{1}{2L_0 + 1} Q_{\kappa} \cdot \frac{2\pi}{v^2} \int W_{\kappa}^1(\rho) d\rho, \quad (36)$$

где σ_m – сечение одноэлектронного перехода в многоэлектронном атоме. Множители Q_{κ} , образовавшиеся внутри суммы по мультиполям, принято называть *Q-факторами*.

Для переходов $L_0 S_0 \rightarrow L_1 S_1$ ($\gamma_0 \rightarrow \gamma_1$)

$$Q_{\kappa}(\gamma_0, \gamma_1) = (2l_0 + 1)(2L_1 + 1)(2L_0 + 1) \left\{ \begin{matrix} l_0 & L_0 & L_c \\ L_1 & l_1 & \kappa \end{matrix} \right\}^2. \quad (37)$$

Для переходов между компонентами тонкой структуры $S_0 L_0 J_0 \rightarrow S_1 L_1 J_1$

$$Q_{\kappa}(\gamma_0 J_0, \gamma_1 J_1) = (2L_0 + 1)(2J_0 + 1) \left\{ \begin{matrix} L_0 & J_0 & S \\ J_1 & L_1 & \kappa \end{matrix} \right\}^2 Q_{\kappa}(\gamma_0, \gamma_1). \quad (38)$$

Результаты и обсуждение

Расчеты в рамках метода параметра столкновения сечений возбуждения при столкновениях с тяжелыми частицами проще, чем с помощью чисто квантовых методов. Однако этот метод предполагает ряд допущений. С другой стороны, расчеты в q -представлении сталкиваются с трудностями при учете кулоновского взаимодействия

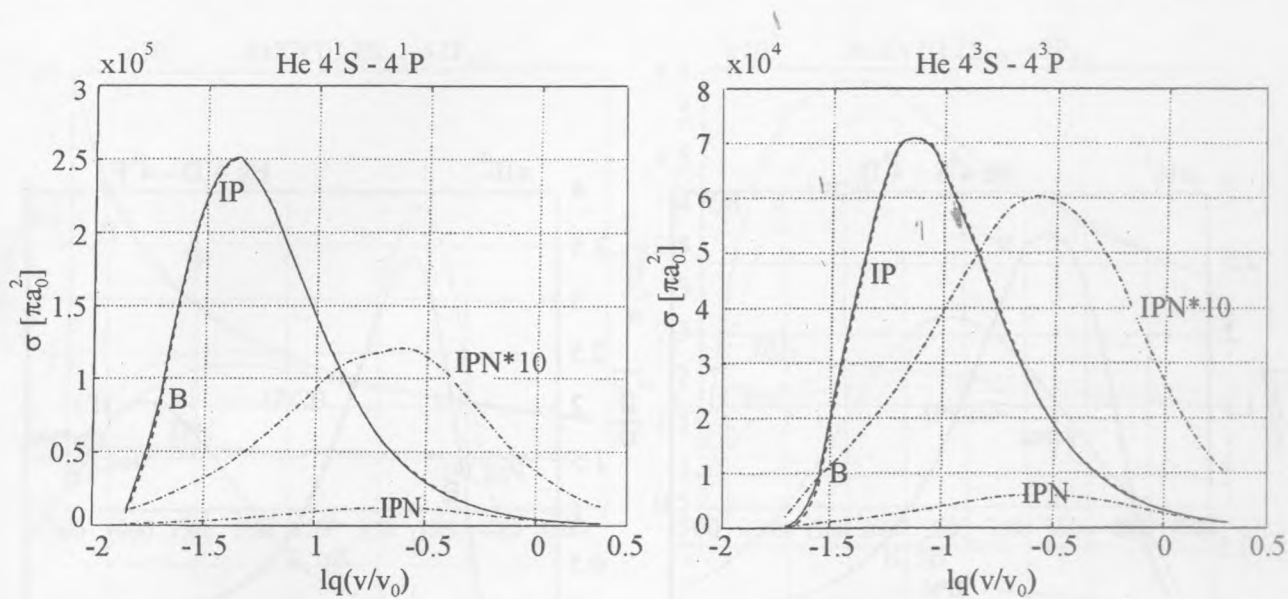


Рис. 2. Сечения переходов $4^1S \rightarrow 4^1P$, $4^3S \rightarrow 4^3P$, в He при столкновениях с протонами. Кривая "B" – квантовые расчеты в q -представлении, "IP" – в рамках метода параметра столкновения, "IPN" – метод параметра столкновения с учетом нормировки.

и нормировке, а в представлении парциальных волн возникают проблемы для больших масс из-за больших величин орбитальных моментов налетающей и рассеянной частиц.

На рис. 2, 3 представлены сечения столкновительных переходов в гелии, вычисленные в обычном борновском приближении в q -представлении, и вычисленные в рамках приближения параметра столкновения (кривые "B" и "IP"). Они практически совпадают. Для тех же переходов приведены также нормированные сечения, вычисленные в представлении параметра столкновения (кривая "IPN"). Видно, что при небольших скоростях нормировка принципиально меняет результаты вычислений. Т.к. нормировка особенно существенна в области сильного взаимодействия, то при ее применении максимум сечения (кривая "IPN*10") достигается при другом значении скорости налетающей частицы.

Сравнение процедуры нормировки в представлении параметра столкновения с квантовым аналогом – методом К-матрицы [1] и исследование влияния дальнегодействующего кулоновского взаимодействия приведены на рис. 4 на примере перехода $2S_{1/2} - 2P_{3/2}$ в многозарядном ионе $ArXVIII$.

Рис. 4 показывает, что, как и для нейтрального атома, результаты, полученные в борновском приближении в q -представлении и вычисленные в представлении параме-

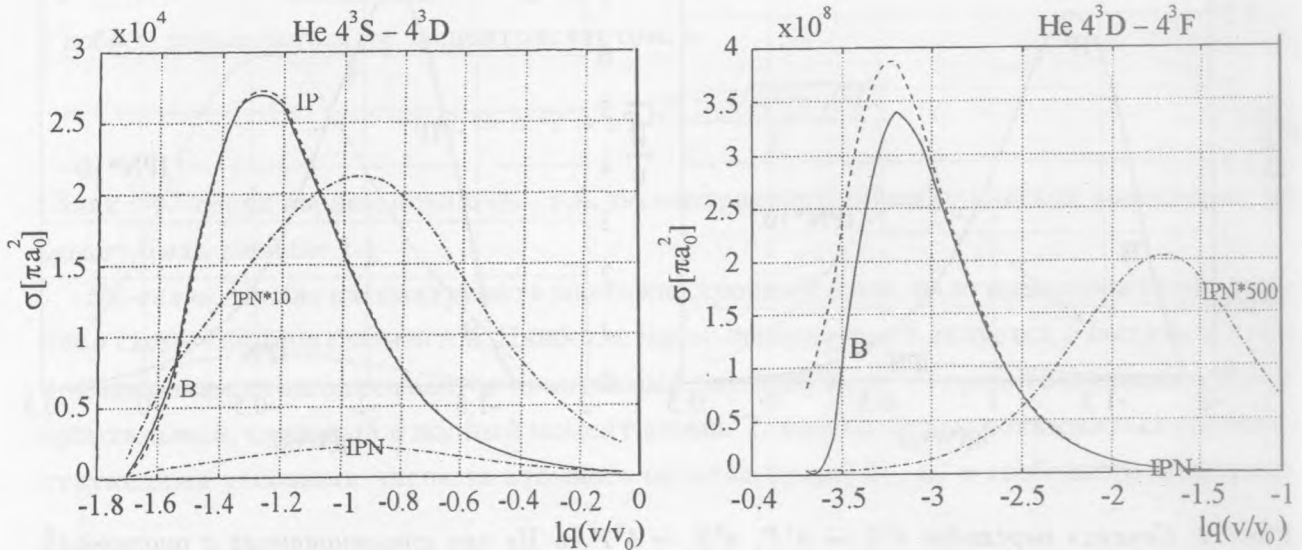


Рис. 3. Сечения переходов $4^3S \rightarrow 4^3D$, $4^3D \rightarrow 4^3F$ в He при столкновениях с протонами. Кривая "B" – квантовые расчеты в q -представлении, "IP" – в рамках метода параметра столкновения, "IPN" – метод параметра столкновения с учетом нормировки.

тра столкновения (без нормировки и учета кулоновского отталкивания – кривые "B" и "IP"), хорошо согласуются. Эффекты кулоновского отталкивания (кривые, содержащие в названии "CB") и нормировки (кривые, названия которых оканчивающиеся на "N") весьма существенны, и для данного перехода описываются методом парциальных волн (через К-матрицу) и методом параметра столкновения практически одинаково. Кривая "IPN" получена в представлении параметра столкновения с нормировкой, но без учета отталкивания. В данном случае эффект кулоновского отталкивания значительно слабее эффекта нормировки. При дальнейшей экстраполяции все методы стремятся к общему пределу.

Таким образом, метод параметра столкновения в предложенной (программа "АТИРМ") реализации, основанной на численном расчете потенциала взаимодействия (с помощью программы "АТОМ"), применима для массовых расчетов переходов в атомах и ионах при столкновениях с тяжелыми заряженными частицами.

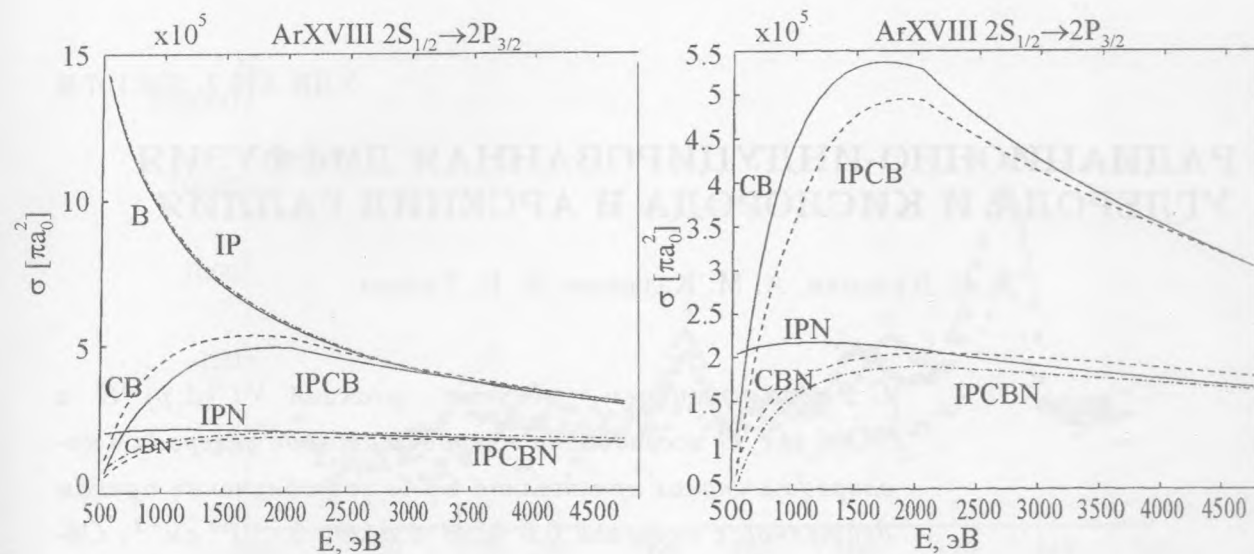


Рис. 4. Сечение переходов $2S_{1/2} \rightarrow 2P_{3/2}$ в ионе $ArXVIII$ при соударениях с протонами. Кривая "B" – квантовые расчеты в q -представлении, "CB" – квантовый кулон-борновский расчет в представлении парциальных волн, "CBN" – то же самое с нормировкой, "IP" – в рамках метода параметра столкновения, "IPN" – метод параметра удара с учетом нормировки, "IPCB" – с учетом гиперболичности траектории, "IPCBN" – кулон-борновское приближение с нормировкой.

Авторы признательны Л. П. Преснякову за обсуждение работы.

Работа была поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты N 97-02-16919 и N 98-02-22027).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В а й н ш т е й н Л. А., С о б е л ь м а н И. И., Ю к о в Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М., Наука, 1979.
- [2] S e a t o n M. J. The Impact Parameter Method for Electron Excitations of Optically Allowed Atomic Transitions, PROC. PHYS. SOC., 1962, vol. 79.
- [3] L e b e d e v V. S., B e i g m a n I. L. Physics of Highly Excited Atoms and Ions. Springer Series on Atoms+Plasmas, v. 22.
- [4] С о б е л ь м а н И. И. Введение в теорию атомных спектров. М., Наука, 1977.

Поступила в редакцию 3 декабря 1999 г.