*Краткие сообщения по физике № 4 1980*

# ФОТОРЕКОМБИНАЦИЯ С ВОЗБУЖДЕНИЕМ

Б. Н. Чичков

УДК 539.182

Проведены квазиклассические оценки сечения процесса фоторекомбинации с возбуждением, в котором налетающий электрон сначала возбуждает ион, а затем рекомбинирует с испусканием кванта света. Сечение этого процесса для однозарядных ионов, в рассматриваемом нами диапазоне энергий налетающего электрона, того же порядка величины, что и сечение обычной фоторекомбинации.

Под фоторекомбинацией с возбуждением мы подразумеваем процесс столкновения иона с зарядом $Z+1=z$ (где $z$ - заряд атомного остатка) с электроном, в результате которого образуется ион с зарядом $Z$ в дважды возбужденном состоянии, лежащем ниже границы ионизации, и фотон

$$A^{z}(\gamma_0) + e_0^- \to A^{z-1}(\gamma, nl) + \hbar\omega_\gamma. \tag{1}$$

Энергия фотона

$$\hbar\omega_\gamma = E_0 - \Delta E_{\gamma\gamma_0} + I_n, \tag{2}$$

где $E_0$ - энергия налетающего электрона, $\Delta E_{\gamma\gamma_0}$ - энергия возбуждения иона ($\gamma_0$ - основное, $\gamma$ - возбужденное состояния иона $A^z$), $I_n$ - энергия ионизации уровня $nl$. Процесс фоторекомбинации с возбуждением можно разделить на два этапа. На первом этапе происходит возбуждение иона налетающим электроном

$$A^{z}(\gamma_0) + e_0^- \to A^{z}(\gamma) + e^-, \tag{3}$$

в результате которого налетающий электрон теряет энергию $E_I = E_0 - \Delta E_{\gamma\gamma_0}$. На втором этапе происходит захват электрона в какое-то состояние $nl$ с одновременным испусканием фотона

$$A^{z}(\gamma) + e^{-} \longrightarrow A^{z-1}(\gamma, nl) + \hbar\omega_{\gamma}. \qquad (4)$$

В отличие от этого процесса в обычной фоторекомбинации налетающий электрон сразу захватывается ионом с одновременным испусканием фотона $\hbar\omega_{\gamma_0}$ /I/

$$A^{z}(\gamma_0) + e_0^{-} \longrightarrow A^{z-1}(\gamma_0, nl) + \hbar\omega_{\gamma_0},$$
$$\hbar\omega_{\gamma_0} = E_0 + I_n.$$

Вероятность такого захвата растет с уменьшением энергии налетающего электрона. Поэтому может оказаться, что в некоторых случаях налетающему электрону "выгоднее" сначала возбудить ион, т.е. потерять энергию и тем самым увеличить вероятность последующей фоторекомбинации, чем сразу рекомбинировать.

Будем рассматривать налетающий электрон как классическую частицу, пролетающую на прицельном расстоянии $\rho$ от иона. Если скорость налетающего электрона $v_0$ удовлетворяет борновскому условию $ze^2/\hbar v_0 < 1$, где $z$ - спектроскопический символ, то вероятность возбуждения иона можно найти по нестационарной теории возмущений

$$W^{ex}(\rho) = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\Delta Et} \langle 1|V(t)|0\rangle dt \right|^2. \qquad (5)$$

Здесь и в дальнейшем используются атомные единицы ($e = \hbar = m = 1$). В формуле (5) $\Delta E = I_0 - I_1$ - энергия возбуждения иона; $I_0$, $I_1$ - энергии ионизации основного $|0\rangle$ и возбужденного $|1\rangle$ состояний. $V(t) = 1/R(t)$ - энергия взаимодействия налетающего и валентного электрона, $R(t)$ - расстояние между ними.

Из (5), пренебрегая искривлением траектории налетающего электрона, легко получить (см., например, /2/) следующее выражение для вероятности возбуждения:

$$W^{ex}(\rho) = \frac{2}{\rho^2}\frac{1}{E_0}\frac{f_{01}}{\Delta E}\beta\left[K_0^2(\beta) + K_1^2(\beta)\right], \qquad (6)$$

где $E_0$ - энергия налетающего электрона, $f_{01}$ - сила осциллятора перехода, $\beta = \Delta E\rho/\sqrt{2E_0}$, $K_0(\beta)$ и $K_1(\beta)$ - модифицированные функции Бесселя (функции Макдональда). Сечение возбуждения, вычисленное с помощью (6), дает хорошо известную формулу Бете

$$\sigma^{ex} = 4\pi \frac{1}{E_0} \frac{f_{01}}{\Delta E} \left( \ln \frac{2\sqrt{2E_0}}{\rho_0 \Delta E} - C \right), \tag{7}$$

где $\rho_0 = 1/z$ – эффективный радиус иона, C – постоянная Эйлера.

Если энергия электрона после взаимодействия $E_1 = E_0 - \Delta E$ удовлетворяет условию квазиклассичности $z/\sqrt{2E_1} > 1$ (условие квазиклассичности обратно условию борновости), то для вероятности фоторекомбинации на уровень с главным квантовым числом n можно воспользоваться известными формулами Крамерса /I,3/

$$W^f(\rho) = \frac{\pi}{6c^3} \frac{z^4\omega}{E_1^2} \frac{1}{n^3} H,$$

$$H = \frac{1}{i\eta\varepsilon} \frac{d}{d(i\eta\varepsilon)} \left(i\eta\varepsilon H_{i\eta}^{(1)}(i\eta\varepsilon) H_{i\eta}^{(1)\prime}(i\eta\varepsilon)\right), \tag{8}$$

где $\omega = E_0 - \Delta E + z^2/2n^2 = E_1 + z^2/2n^2$ – энергия кванта, $H_{i\eta}^{(1)}(i\eta\varepsilon)$ и $H_{i\eta}^{(1)\prime}(i\eta\varepsilon)$ – функция Ганкеля и ее производная, $\eta = z\omega/(2E_1)^{3/2}$, $\varepsilon = \sqrt{1 + \rho^2/a^2}$, $a = z/2E_1$, c – скорость света. В формуле (8) учтено искривление траектории налетающего электрона за счет притяжения к положительно заряженному иону. Расчет сечения фоторекомбинации с помощью (8) дает (формула Крамерса):

$$\sigma_f = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \frac{1}{c^3} \frac{z^4}{\omega E_1} \frac{1}{n^3}. \tag{9}$$

Вероятность фоторекомбинации с возбуждением можно определить как произведение вероятности возбуждения и фоторекомбинации, тогда для сечения фоторекомбинации с возбуждением $\sigma_f^{ex}$ будем иметь:

$$\sigma_f^{ex} = 2\pi \int_0^\infty W^{ex} W^f \rho d\rho = \frac{2\pi^2}{3} \frac{1}{c^3} \frac{z^4 \omega f_{01}}{E_1^2 E_0 \Delta E} \frac{1}{n^3} I,$$

$$I = \int_0^\infty \frac{1}{\beta} \left[K_0^2(\beta) + K_1^2(\beta)\right] H d\rho. \tag{10}$$

Напомним, что эта формула имеет смысл в узком интервале энергий налетающего электрона

$$E_0 > z^2/2; \; E_0 - \Delta E = E_1 < z^2/2. \tag{11}$$

Интеграл в (10) можно представить как сумму двух интегралов

$$I = \int_0^a f(\rho)d\rho + \int_a^\infty f(\rho)d\rho, \qquad (I2)$$

где $a = z/2E_1$. В пределе $E_1 \ll \Delta E$, $E_0$ вторым интегралом в (I2) можно пренебречь, а оставшийся интеграл разложить в ряд по $\rho_0/a$. Нулевой порядок разложения дает следующую формулу для сечения фоторекомбинации с возбуждением:

$$\sigma_f^{ex} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi^2}\frac{1}{z}\left(\frac{6\omega^2}{z}\right)^{1/3}\Gamma^2(2/3)E_1\sigma_f(E_1)\sigma^{ex}(E_0). \qquad (I3)$$

Из этой формулы видно, что сечение фоторекомбинации с возбуждением в пороге, т.е. когда $E_0 \to \Delta E$, $E_1 \to 0$, остается конечной величиной, так как $\sigma_f(E_1) \sim 1/E_1$, а $\sigma^{ex}$ конечно в пороге.

В другом предельном случае, когда $\Delta E \ll E_0 \sim E_1 \sim z^2/2$, разлагая (I0) по степеьям $\Delta E/z^2$, легко получить

$$\sigma_f^{ex} = 2^3 \frac{f_{01}}{z^2 \Delta E} E_0 \sigma_f(E_0). \qquad (I4)$$

Сечение обратного процесса - фотоионизации с девозбуждением - находится из обычного соотношения, связывающего взаимно обратные процессы

$$\sigma_i^{dex} = \frac{2c^2 E_0}{\omega^2}\frac{g_{I_0}}{g_A}\sigma_f^{ex}, \qquad (I5)$$

где $g_{I_0}$ - статвес иона в основном состоянии, $g_A$ - статвес атома.

Аналогичную (I4) формулу можно получить и для фотоионизации с возбуждением

$$\sigma_i^{ex} = 2^3 \frac{f_{01}}{z^2 \Delta E} E_0 \sigma_i(E_0), \qquad (I6)$$

где $\sigma_i(E_0)$ - обычное сечение фотоионизации, $E_0$ - энергия вылетевшего электрона, $\sigma_i^{ex}$ - сечение фотоионизации с возбуждением. В (I6) $E_0 = E_1 - \Delta E$, $\Delta E \ll E_1$, $E_0$. Формулу, аналогичную (I3), для сечения фотоионизации с возбуждением получить нельзя.

Проведем оценку сечения фоторекомбинации с возбуждением для рекомбинации ионов $He^+$

$$He^+(1s) + e_0^- \to He^+(2s) + e^- \to He(1s2s) + \hbar\omega.$$

В этом случае можно воспользоваться формулой (I3). Оценка по этой формуле дает $\sigma_f^{ex} \sim [\pi a_0^2]\,0{,}4 . 10^{-7}$ для энергии налетающего электрона $E_0 = z^2/2 = 2$.

Этот процесс надо сравнивать с процессом обычной фоторекомбинации

$$He^+(1s) + e_0^- \longrightarrow He(1s2s) + \hbar\omega,$$

сечение которого, при энергии налетающего электрона $E_0 = z^2/2 = 2$, $\sigma_r \sim [\pi a_0^2]\, 0{,}1 \cdot 10^{-7}$.

В случае рекомбинации ионов $Be^+$ возможен следующий процесс:

$$Be^+(2s) + e_0^- \longrightarrow Be^+(2p) + e^- \longrightarrow Be(2s2p) + \hbar\omega.$$

Сечение этого процесса можно оценить по формуле (I4). При энергии налетающего электрона, равной энергии ионизации уровня 2s, будем иметь $\sigma_r^{ex} \sim 3\sigma_r$.

В обоих случаях оценки сечений фоторекомбинации с возбуждением дают величину, совпадающую с точностью до порядка с сечением обычной фоторекомбинации. Эти оценки имеют следующие погрешности: во-первых, мы использовали выражение вероятности рекомбинации с возбуждением через произведение вероятностей возбуждения и рекомбинации; во-вторых, вероятности возбуждения находили в борновском приближении, а вероятности фоторекомбинации в квазиклассическом; и, наконец, использовали ненормированные вероятности. Несмотря на перечисленные погрешности, из приведенных выше оценок следует, что сечение процесса фоторекомбинации с возбуждением не является пренебрежимо малым и в случае рекомбинации одно- или двухзарядных ионов в области температур, достаточных для возбуждения иона, этот процесс может быть существенным.

Автор выражает глубокую благодарность И. Л. Бейгману и Л. П. Преснякову за полезные обсуждения и внимание к работе.

Поступила в редакцию
22 января 1980 г.

## Литература

I. И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. "Наука", 1977 г.

2. Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. "Наука", 1979 г.

3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теория поля. "Наука", 1973 г.