

# РЕЗОНАНСНЫЙ ЗАХВАТ ЭЛЕКТРОНОВ ИОНАМИ В РИДБЕРГОВСКИЕ СОСТОЯНИЯ АТОМОВ

*B. C. Лебедев<sup>\*</sup>, K. C. Кислов, A. A. Нарциц*

*Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук  
119991, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 14 августа 2019 г.,  
после переработки 26 октября 2019 г.  
Принята к публикации 29 октября 2019 г.

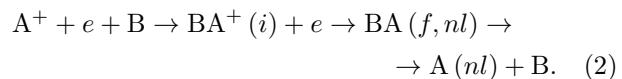
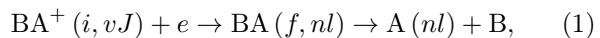
Исследованы резонансные механизмы электрон-ионной рекомбинации с образованием атомов в ридберговских состояниях в плазме, содержащей атомарные и молекулярные ионы. Разработан аналитический подход к описанию процесса трехчастичного захвата электрона в ридберговское состояние в результате резонансной передачи энергии от свободного электрона электронной оболочке квазимолекулярного иона, образующегося в ходе столкновения атомарного иона с атомом буферного газа. Предложен эффективный способ расчета констант скоростей диссоциативной рекомбинации в условиях теплового возбуждения всех колебательно-вращательных уровней молекулярного иона. Установлены зависимости сечений и констант скоростей исследуемых процессов от главного квантового числа и выяснена их относительная роль в широком диапазоне температур электронов,  $T_e$ , и газовой компоненты,  $T$ , плазмы. Определены условия доминирования интегральных вкладов непрерывного спектра молекулы и всего колебательно-вращательного квазиконтиума в полную скорость резонансного захвата электрона. Конкретный анализ проведен на примере гетероядерных систем  $\text{Ne}+\text{Xe}^+ + e$  и  $\text{Ar}+\text{Xe}^+ + e$  с существенно различными энергиями диссоциации ( $D_0 = 33$  и  $171$  мэВ) основного электронного терма иона  $\text{RgXe}^+$  ( $\text{Rg} = \text{Ne}$  и  $\text{Ar}$ ). Показано, что величины констант скоростей захвата существенно зависят от энергии связи  $|\varepsilon_n|$  образующегося атома  $\text{Xe}(n)$ , температур  $T$  и  $T_e$  и от соотношения величины  $D_0$  и тепловой энергии  $k_B T$ .

DOI: 10.31857/S004445102004001X

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы рекомбинации атомарных и молекулярных ионов с электронами интенсивно исследуются в течение десятилетий [1–5]. Это связано с их ролью в физике газовых разрядов и активных сред плазменных лазеров, в спектроскопии плазмы, в физике звездных и планетных атмосфер. Многие рекомбинационные процессы подробно изучены. Это, в частности, касается диссоциативной рекомбинации электронов с молекулярными ионами [6]. Эффективность «прямого механизма» этого процесса обусловлена тем, что он происходит в результате неадиабатического перехода между электронными термами системы и сопровождается резонансным обменом энергии с внутренними электронами системы  $\text{BA}^+ + e$ .

В настоящей работе проведено исследование резонансных механизмов электрон-ионной рекомбинации с образованием ридберговских атомов в плазме, содержащей атомарные и молекулярные ионы:



Реакция (1) представляет собой резонансный захват электрона молекулярным ионом на высоковозбужденный уровень атома (диссоциативную рекомбинацию). Здесь  $i$  и  $f$  обозначают начальный,  $U_i(R)$ , и конечный,  $U_f(R)$ , электронные термы иона  $\text{BA}^+$ ,  $v$  и  $J$  — его колебательное и вращательное квантовые числа в начальном состоянии  $i$ ,  $n$  и  $l$  — главное и орбитальное квантовые числа ридберговского атома  $\text{A}(nl)$ . В процессе (1) ядра системы  $\text{BA}^+ + e$  совершают связанно-свободный переход. Рассматриваемые в работе условия существенно отличаются

\* E-mail: vslebedev.mobile@gmail.com

от обычно создаваемых при исследовании диссоциативной рекомбинации сильносвязанных молекулярных ионов [5, 6], когда заселено небольшое число их колебательно-вращательных уровней  $vJ$ . Нас интересуют условия, при которых вклад в рекомбинацию вносит огромное число уровней  $vJ$ . В работе разработан эффективный способ расчета суммарного вклада всех этих уровней в полные сечения и константы скорости диссоциативной рекомбинации.

Реакция (2) — захват электрона атомарным ионом в ридберговское состояние в тройном столкновении с атомом (трехчастичная рекомбинация). При традиционном механизме столкновений [1], обусловленном упругим рассеянием слабосвязанного электрона на атоме В в поле иона  $A^+$ , такой процесс приводит к захвату электрона лишь на очень высокие уровни  $n$ . В данной работе исследован существенно более эффективный резонансный механизм, при котором свободно-связанный переход внешнего электрона сопровождается свободно-свободным переходом ядер квазимолекулы  $VA^+ + e$ , образующейся в ходе столкновения частиц В и  $A^+$ . Так же, как и в процессе (1), изучаемый механизм захвата (2) происходит в результате пересечения начального,  $U_i(R) + \varepsilon$ , и конечного,  $U_f(R) + \varepsilon_{nl}$ , электронных термов системы  $VA^+ + e$ , где  $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e$  — энергия свободного электрона,  $\varepsilon_{nl} = -Ry/n_*^2$  — энергия ридберговского электрона.

В отличие от диссоциативной рекомбинации (1) в литературе мало известно о канале (2) трехчастичного захвата электрона, происходящего посредством формирования квазимолекулы при столкновении атома В и иона  $A^+$ . Были рассчитаны [7] сечения и константы скорости рекомбинационного заселения ридберговских состояний  $H(n)$  в тройных столкновениях с атомами гелия вследствие прямой передачи энергии свободного электрона в относительное движение ядер иона  $HeH^+$  аналогично рассмотренным в [8, 9] неупругим переходам  $n \rightarrow n'$  и ионизации. В случае резонансной тройной рекомбинации имеются расчеты констант скоростей этого процесса с образованием атомов  $H(n)$  и  $He(n)$ , выполненные полуклассическим методом в работах [10–12] для симметричных столкновений с участием водорода и гелия в условиях звездных атмосфер ( $T \sim 5000 \div 10000$  К).

Обратными процессами для реакций (1) и (2) являются ассоциативная и прямая ионизация ридберговских атомов  $A(nl)$  при столкновениях с нейтральными частицами В, обусловленная резонансным обменом энергий внешнего и внутренних электронов квазимолекулы  $VA^+ + e$ , образующейся в ходе

рассеяния атома В на атомном остатке  $A^+$ . В зависимости от типа системы и симметрии электронных термов ионизация может происходить в результате дипольного [13] или квадрупольного и короткодействующего [14] взаимодействия внешнего электрона с  $VA^+$ . Резонансные механизмы ионизации обычно являются основными при небольших и промежуточных значениях  $n$ . С увеличением главного квантового числа доминирующим становится [15] механизм рассеяния квазиводного электрона на возмущающем атоме.

Аналогично происходят и неупругие переходы между ридберговскими уровнями, сопровождаемые резонансной передачей энергии внешнему электрону от электронной подсистемы гомоядерного [16] или гетероядерного [17] квазимолекулярного иона. Эффективность резонансных переходов  $n \rightarrow n'$  оказывается в широкой области значений  $n$  значительно выше, чем в случае альтернативных нерезонансных процессов квазиупругих переходов  $l$ -,  $nl$ - и  $J$ -перемешивания [18–20].

Возможность сильного увеличения скорости рекомбинации электронов с атомарными ионами в тройных столкновениях со свободными электронами в результате резонансных переходов  $n \rightarrow n'$ , приводящих к девозбуждению рекомбинирующего электрона атомами буферного газа, была продемонстрирована в работе [17]. Сделанные в недавней статье [21] оценки указывают на возможность резкого увеличения скорости рекомбинационного заселения относительно невысоких ридберговских уровней и роста результирующего коэффициента рекомбинации благодаря вкладу резонансных свободно-связанных переходов электрона.

Цель данной работы состоит в исследовании процесса (1) в условиях теплового возбуждения огромного числа колебательно-вращательных уровней и построении полукvantовой теории резонансной тройной рекомбинации (2). Это включает в себя развитие единого подхода к описанию этих процессов и вывод формул для их эффективных сечений и констант скоростей. Конкретные расчеты и анализ эффективностей реакций (1) и (2) выполнены на примерах систем  $Rg + Xe^+ + e$  ( $Rg = Ne$  и  $Ar$ ) при малых концентрациях ксенона,  $[Xe] \ll [Rg]$ . Гетероядерные ионы  $RgXe^+$  имеют сравнительно невысокие энергии диссоциации  $D_0$  основного терма ( $D_0^{HeXe^+} = 13.1$  мэВ,  $D_0^{NeXe^+} = 33$  мэВ,  $D_0^{ArXe^+} = 171$  мэВ,  $D_0^{KrXe^+} = 400$  мэВ [22, 23]), поэтому их  $vJ$ -уровни оказываются сильно возбужденными даже при газовых температурах  $T \approx 300 \div 1000$  К.

## 2. ИСХОДНЫЕ ФОРМУЛЫ

Полный гамильтониан квазимолекулы  $\text{BA}^+ + e$  в системе центра масс имеет вид

$$H = T_{\mathbf{R}} + H_{\text{BA}^+} + H_e + V, \quad H_e = -\frac{\hbar^2 \Delta_{\mathbf{r}}}{2m_e} - \frac{e^2}{r}. \quad (3)$$

Здесь  $T_{\mathbf{R}} = -\hbar^2 \Delta_{\mathbf{R}}/2\mu$  — оператор кинетической энергии относительного движения ядер;  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B$  — радиус-вектор, соединяющий ядра,  $\mu$  — их приведенная масса;  $H_e$  — гамильтониан внешнего электрона,  $H_{\text{BA}^+}(\mathbf{r}_k, \mathbf{R})$  — электронный гамильтониан квазимолекулярного иона  $\text{BA}^+$  в приближении Борна–Оппенгеймера. Потенциальная энергия

$$V = \sum_k \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_k|} - \frac{Z_A e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_A|} - \frac{Z_B e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_B|} + \frac{e^2}{r} \quad (4)$$

определяется кулоновским взаимодействием внешнего электрона ( $\mathbf{r}$ ) со всеми внутренними электронами ( $\mathbf{r}_k$ ,  $k = 1, \dots, N$ ) и ядрами ( $\mathbf{R}_A$  и  $\mathbf{R}_B$  — их радиус-векторы в системе центра масс). Последний член включен в (4), чтобы скомпенсировать кулоновский член, который был включен в гамильтониан  $H_e$ .

Будем исходить из общего выражения для дифференциального сечения,  $d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{di}(E')/d\varepsilon$  [см<sup>2</sup>·эрг<sup>-1</sup>], резонансного процесса прямой ионизации, сопровождаемого неадиабатическим переходом между двумя электронными термами  $U_i(R)$  и  $U_f(R)$  квазимолекулярного иона  $\text{BA}^+$ , временно образующегося при столкновении частиц A<sup>+</sup> и B (см. формулу (11) в [14]), и соотношения детального баланса для эффективного сечения,  $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(E)$  [см<sup>4</sup>·с], захвата электрона на ридберговский уровень атома A(*nl*) в тройном столкновении (2):

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(E) = \frac{g_f}{g_i} \frac{2\pi^2 \hbar(2l+1)}{k^2} \frac{(q')^2}{q^2} \frac{d\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{di}(E')}{d\varepsilon}, \quad (5)$$

$$E' = \hbar^2(q')^2/2\mu = E + \varepsilon + |\varepsilon_{nl}|. \quad (6)$$

Здесь  $E'$  — кинетическая энергия сталкивающихся частиц A<sup>+</sup> и B в конечном канале реакции (2),  $E = \hbar^2 q^2/2\mu$ ;  $\varepsilon = \hbar^2 k^2/2m_e$  — энергия электрона в непрерывном спектре;  $\varepsilon_{nl} = -Ry/n_*^2$  — энергия ридберговского электрона,  $n_* = n - \delta_l$ ,  $\delta_l$  — квантовый дефект атомного уровня *nl*. Отношение  $g_f/g_i$  выражается в виде  $g_{\text{BA}^+(f)}/(g_{\text{B}(i)} g_{\text{A}^+(i)}) \equiv g_r$ .

Подставляя формулу (11) из статьи [14] в (5), получаем выражение для эффективного сечения захвата электрона в результате неадиабатического процесса (2):

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(E) = \tilde{g}_{tr} \frac{8\pi^5 \hbar}{q^2 k^2} \sum_J (2J+1) \times \\ \times \sum_{l'm', m} \left| \left\langle \chi_{EJ}^{(i)}(R) \right| V_{i, \varepsilon l'm'}^{f, nlm}(R) \left| \chi_{E'J}^{(f)}(R) \right\rangle \right|^2. \quad (7)$$

Здесь  $\chi_{EJ}^{(i)}(R)$  и  $\chi_{E'J}^{(f)}(R)$  — радиальная волновая функция относительного движения ядер в начальном и конечном состояниях;  $J$  — орбитальный угловой момент иона  $\text{BA}^+$ .  $\tilde{g}_{tr}$  определяется как  $g_{tr}/\mathfrak{s}$ , где  $\mathfrak{s}$  равен 2 для гомоядерных систем в случае, когда  $U_i$  или  $U_f$  является  $\Sigma$ -термом, или 1 в противном случае.  $V_{i, \varepsilon l'm'}^{f, nlm}(\mathbf{R})$  — электронный матричный элемент свободно-связанного неадиабатического перехода,

$$V_{i, \varepsilon l'm'}^{f, nlm}(\mathbf{R}) = \langle \psi_{\varepsilon l'm'} | \phi_i | V(\mathbf{r}_k, \mathbf{R}) | \phi_f \rangle | \psi_{nlm} \rangle, \quad (8)$$

где  $\phi_i(\mathbf{r}_k, \mathbf{R})$  и  $\phi_f(\mathbf{r}_k, \mathbf{R})$  — электронные волновые функции иона  $\text{BA}^+$ , соответствующие термам  $U_i(R)$  и  $U_f(R)$ .  $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$  — волновая функция ридберговского атома,  $\psi_{\varepsilon l'm'}(\mathbf{r}) = \mathcal{R}_{\varepsilon l'}(r) Y_{l'm'}(\mathbf{n}_r)$ , а  $\mathcal{R}_{\varepsilon l'}(r)$  нормирована на  $\delta(\varepsilon - \varepsilon')$ . Матричный элемент (8) связан с шириной автоионизации квазимолекулы  $\text{BA}(nl)$ :

$$\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R) = \frac{2\pi}{2l+1} \sum_{m, m', l'} \left| V_{i, \varepsilon l'm'}^{f, nlm}(R) \right|^2. \quad (9)$$

Из выражения [14] для парциального сечения  $\sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{ai}(E'J)$  ассоциативной ионизации ридберговского атома A(*nl*) в столкновении с атомом B и соотношения детального баланса получим формулу для сечения  $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(vJ)$  захвата электрона на ридберговский уровень атома A(*nl*) в процессе диссоциативной рекомбинации иона  $\text{BA}^+$ , находящегося в состоянии *vJ*:

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(vJ) = \frac{g_{\text{BA}^+(f)}}{g_{\text{BA}^+(i)}} \frac{(2l+1)q^2}{(2J+1)k^2} \sigma_{nl \rightarrow \varepsilon}^{ai}(E'J). \quad (10)$$

Это приводит к следующему результату:

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(vJ) = g_{dr} \frac{4\pi^3}{k^2} S_{nl}^J \times \\ \times \sum_{l'm', m} \left| \left\langle \chi_{vJ}^{(i)}(R) \right| V_{i, \varepsilon l'm'}^{f, nlm}(R) \left| \chi_{E'J}^{(f)}(R) \right\rangle \right|^2, \quad (11)$$

где  $g_{dr} = g_{\text{BA}^+(f)}/g_{\text{BA}^+(i)}$ . Отметим, что всюду здесь и далее мы полагаем  $J' = J$ . Это оправдано, поскольку основной вклад в суммы по *J* в формулах (7) и (23) для сечений вносят большие значения *J*,  $J \gg 1$ . В формулу (11) введен так называемый фактор выживания  $S_{nl}^J$ , который учитывает

влияние на процесс диссоциативной рекомбинации обратного распада автоионизационного ридберговского состояния молекулы ВА ( $f, nl \rightarrow \text{BA}^+ (i) + e$ ). Известно, что учет этого процесса может приводить к уменьшению результирующих сечений, если значение  $n$  мало. При квазиклассическом рассмотрении [6, 24] фактор выживания  $S_{nl}^J$  определяется выражением

$$S_{nl}^J = \exp \left[ - \int_{R_\omega}^{R_{st}} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R)}{\hbar} \frac{dR}{V_{E'J}^{(f)}(R)} \right], \quad (12)$$

где  $R_\omega$  — точка перехода (см. разд. 3), а  $V_{E'J}^{(f)}(R)$  — относительная скорость тяжелых частиц в конечном канале реакции:

$$V_{E'J}^{(f)}(R) = \sqrt{\frac{2}{\mu} \left[ E' - U_f^J(R) \right]}. \quad (13)$$

Величина  $R_{st} \equiv R_{nl}$  в (12) называется точкой стабилизации, за пределами которой ( $R > R_{st}$ ) обратная автоионизация становится невозможной в пренебрежении экспоненциально малым вкладом от подбарьерной области. Она определяется из уравнения

$$U_i(R_{st}) = U_f(R_{st}) - Ry/n_*^2. \quad (14)$$

При низких энергиях электрона  $\varepsilon \rightarrow 0$  точки  $R_\omega$  и  $R_{st}$  практически совпадают, и влиянием автоионизационного распада можно пренебречь. Расчеты показывают, что для гетероядерных ионов инертных газов, содержащих ксенон, при интересующих нас энергиях  $R_\omega \approx R_{st}$ , что позволяет положить  $S_{nl}^J = 1$ .

### 3. РАСЧЕТ ЭФФЕКТИВНЫХ СЕЧЕНИЙ РЕЗОНАНСНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ

Для заданной частоты перехода  $\omega = (\varepsilon + |\varepsilon_{nl}|)/\hbar$  акт резонансного захвата электрона происходит в окрестности точки пересечения  $R_\omega$  потенциальных кривых  $U_{i,\varepsilon}(R) = U_i(R) + \varepsilon$  и  $U_{f,nl}(R) = U_f(R) + \varepsilon_{nl}$ ,

$$U_i(R_\omega) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = U_f(R_\omega) - \frac{Ry}{n_*^2}. \quad (15)$$

В точке  $R_\omega$  энергия  $\hbar\omega = \varepsilon + |\varepsilon_{nl}|$ , отдаваемая падающим электроном при захвате на уровень  $nl$ , становится равной энергии расщепления  $\Delta U_{fi}(R_\omega) = U_f(R_\omega) - U_i(R_\omega)$  электронных термов. Для самосогласованного описания неадиабатических переходов в классически разрешенных и запрещенных областях межъядерного расстояния  $R$  будем использовать квантовую версию теории неадиабатических переходов для случая линейного пересечения кривых потенциальной энергии.

#### 3.1. Сечение захвата электрона атомарным ионом в тройном столкновении с атомом

Рассмотрим процесс резонансного захвата электронов атомарными ионами в случае, когда он сопровождается свободно-свободным переходом ядер квазимолекулы  $\text{BA}^+ + e$ . В приближении линейного пересечения термов квадрат модуля матричного элемента перехода по волновым функциям ядерного движения выражается через функцию Эйри (см. формулу (90.22) в [24]):

$$\sum_{l'm',m} \left| \left\langle \chi_{EJ}^{(i)}(R) \right| V_{i,\varepsilon l'm'}^{f,nlm}(R) \left| \chi_{E'J}^{(f)}(R) \right\rangle \right|^2 = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}} \frac{\eta_{EJ}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \sum_{l'm',m} \left| V_{i,\varepsilon l'm'}^{f,nlm}(R_\omega) \right|^2, \quad (16)$$

$$\eta_{EJ}(R) = \sqrt{\xi_J(R)} \text{Ai}^2[-\xi_J(R)(E - U_i^J(R))], \quad (17)$$

описывающую движение ядер как в надбарьерной, так и в подбарьерной областях. Здесь  $U_i^J(R)$  и  $U_f^J(R)$  — эффективные кривые потенциальной энергии иона  $\text{BA}^+$  с учетом центробежной энергии:

$$U_i^J(R) = U_i(R) + \frac{\hbar^2 (J + 1/2)^2}{2\mu R^2}, \quad (18)$$

$$U_f^J(R) = U_f(R) + \frac{\hbar^2 (J + 1/2)^2}{2\mu R^2},$$

а  $\Delta F_{fi}(R_\omega)$  — разность наклонов этих кривых в точке пересечения  $R_\omega$ :

$$\Delta F_{fi}(R_\omega) = \left| \frac{dU_f(R)}{dR} - \frac{dU_i(R)}{dR} \right|_{R=R_\omega}. \quad (19)$$

Согласно (16) ядерный матричный элемент перехода выражается через электронный матричный элемент  $V_{i,\varepsilon l'm'}^{f,nlm}(R_\omega)$  взаимодействия в точке  $R_\omega$  пересечения кривых потенциальной энергии и функцию Эйри  $\text{Ai}(x)$ . Величина  $\xi_J$  в (17) имеет вид

$$\xi_J(R_\omega) = \left( \frac{2\mu}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left| \frac{\Delta F_{fi}(R_\omega)}{F_f^J(R_\omega) F_i^J(R_\omega)} \right|^{2/3}, \quad (20)$$

где  $F_i^J(R_\omega)$  и  $F_f^J(R_\omega)$  — наклоны кривых эффективной потенциальной энергии в начальном и конечном электронном состояниях:

$$F_i^J(R_\omega) = - \left. \frac{dU_i^J}{dR} \right|_{R_\omega}, \quad (21)$$

$$F_f^J(R_\omega) = - \left. \frac{dU_f^J}{dR} \right|_{R_\omega}.$$

Заменим в формуле (7) суммирование по квантовому числу  $J$  на интегрирование по  $J$ . Тогда, подставляя формулу (16) в (7), учитывая (9) и вводя фактор выживания (12), получаем выражение для эффективного сечения [ $\text{см}^4 \cdot \text{с}$ ] резонансного захвата электрона в ридберговское состояние  $nl$  при тройном столкновении (2):

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(E) = \tilde{g}_{tr}(2l+1) \frac{4\pi^4 \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega) \sqrt{2\mu}}{q^2 k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \int_0^\infty d(J^2) \eta_{EJ}(R_\omega) S_{nl}^J. \quad (22)$$

### 3.2. Усреднение сечения диссоциативной рекомбинации по распределению Больцмана

При больцмановском распределении по уровням  $vJ$  сечение  $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(T)$  [ $\text{см}^2$ ] диссоциативной рекомбинации при температуре газа  $T$  имеет вид

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(T) = (\mathfrak{s} Z_{vr})^{-1} \exp\left(-\frac{D_0}{k_B T}\right) \times \sum_{vJ} (2J+1) \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(vJ) \exp\left(-\frac{E_{vJ}}{k_B T}\right), \quad (23)$$

$$Z_{vr} = \mathfrak{s}^{-1} \sum_{vJ} (2J+1) \exp\left(-\frac{E_{vJ}}{k_B T}\right), \quad (24)$$

где  $E_{vJ} = E_{vJ} + D_0$ . В рассматриваемых условиях суммирование в (23) по  $v$  и  $J$  можно заменить интегрированием по  $dv$  и  $dJ$ . Это оправдано при условии  $k_B T \gtrsim \hbar \omega_e$  ( $\hbar \omega_e$  — нижний колебательный квант иона  $\text{BA}^+(i)$ ) и соответствует приближению квазиконтинуума для колебательно-вращательных состояний ( $E_{vJ} < 0$ ). Воспользуемся соотношением Бора–Зоммерфельда,  $dv = T_{vJ} dE_{vJ}/(2\pi\hbar)$ , согласно которому можно заменить интегрирование по  $v$  на интегрирование по энергии в квазиконтинууме:

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(T) = \frac{\exp(-D_0/k_B T)}{2\pi\hbar\mathfrak{s} Z_{vr}} \times \int_{E_{min}^{dr}}^0 dE_{vJ} \exp\left(-\frac{E_{vJ}}{k_B T}\right) \times \int_0^{J_{max}} T_{vJ} \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(vJ) 2J dJ. \quad (25)$$

Здесь  $E_{min}^{dr} = \max(-D_0, -\varepsilon - Ry/n^2)$ , а  $T_{vJ} = \oint dR/V_{vJ}(R)$  — период колебательно-вращательного движения ядер с энергией  $E_{vJ} < 0$

в эффективном потенциале  $U_i^J(R) = U_i(R) + \hbar^2(J+1/2)^2/(2\mu R^2)$ .

Подставим далее выражения (9) и (11) в (25) и учтем, что квадрат модуля ядерного матричного элемента связанно-свободного перехода отличается от выражения (16) для свободно-свободного перехода лишь нормировочными константами ( $C_{vJ} = 2/\sqrt{T_{vJ}}$  и  $C_{EJ} = \sqrt{2/\pi\hbar}$ ) волновых функций  $\chi_{vJ}^{(i)}(R)$  и  $\chi_{EJ}^{(i)}(R)$  и заменой энергии относительного движения ядер в непрерывном спектре  $E > 0$  на энергию их колебательно-вращательного движения в дискретном спектре  $E_{vJ} < 0$ . Затем введем безразмерные переменные  $\nu$ ,  $\epsilon$  и безразмерную функцию  $\Lambda_\nu(R_\omega)$ :

$$\begin{aligned} \nu &= \frac{\hbar^2 J^2}{2\mu R_\omega^2 k_B T}, \quad \epsilon = \frac{E - U_i(R_\omega)}{k_B T}, \\ \Lambda_\nu(R_\omega) &= k_B T \xi_J(R_\omega) = \\ &= \frac{k_B T}{\hbar^{2/3}} \left| \frac{\Delta F_{fi}(R_\omega) \sqrt{2\mu}}{F_f^\nu(R_\omega) F_i^\nu(R_\omega)} \right|^{2/3}. \end{aligned} \quad (26)$$

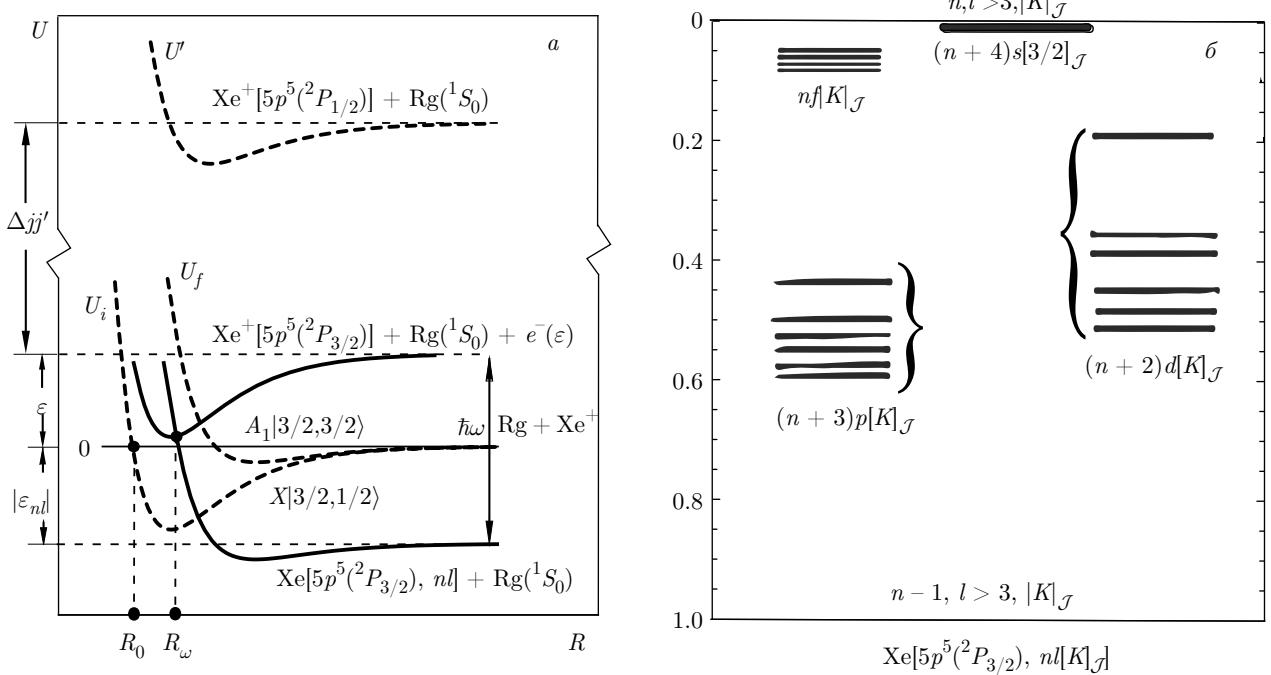
Тогда после ряда преобразований окончательное выражение для усредненного по больцмановскому распределению сечения захвата электрона молекулярным ионом  $\text{BA}^+$  на ридберговский уровень атома  $A(nl)$  приобретает следующий вид:

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(T) = \frac{8\pi^3 (2l+1) \tilde{g}_{dr} R_\omega^2}{k^2 Z_{vr}} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \left( \frac{\mu k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{D_0 + U_i(R_\omega)}{k_B T}\right) \Theta_T^{dr}(R_\omega), \quad (27)$$

где  $\tilde{g}_{dr} = g_{dr}/\mathfrak{s}$ , а безразмерная функция  $\Theta_T^{dr}(R_\omega)$  представляется в виде двойного интеграла:

$$\Theta_T^{dr}(R_\omega) = 2\sqrt{\pi} \int_{\epsilon_{min}^{dr}}^{\epsilon_{max}^{dr}} d\epsilon \exp(-\epsilon) \times \int_0^{\nu_{max}} d\nu \sqrt{\Lambda_\nu(R_\omega)} \text{Ai}^2[-\Lambda_\nu(R_\omega)(\epsilon - \nu)]. \quad (28)$$

Пределы интегрирования по  $d\epsilon$  в (28) равны  $\epsilon_{min}^{dr}(R_\omega) = -U_f(R_\omega)/k_B T$  и  $\epsilon_{max}^{dr}(R_\omega) = -U_i(R_\omega)/k_B T$ , где  $U_f(R) > U_i(R)$  (см. рис. 1), а  $\nu_{max}(\epsilon)$  определяется, согласно (26), максимально возможным значением  $J_{max}(E)$  для каждого фиксированного значения энергии в квазиконтинууме  $E < 0$ . Величина  $J_{max}(E)$  находится из условия  $|U_i^J(R_e^J)| \geq |E|$  ( $R_e^J$  — равновесное межъядерное расстояние в потенциальной яме  $U_i^J$ , см. (18)).



**Рис. 1.** а) Схематическое изображение кривых потенциальной энергии  $U_i(R)$ ,  $U_f(R)$  и  $U'(R)$  низких электронных термов  $X |j_i = 3/2, \Omega_i = 1/2\rangle$ ,  $A_1 |j_f = 3/2, \Omega_f = 3/2\rangle$  и  $A_2 |j' = 1/2, \Omega' = 1/2\rangle$  иона  $\text{RgXe}^+$  (штриховые линии) и квазимолекулы  $\text{RgXe}^+ + e^-$ :  $U_i(R) + \varepsilon$  и  $U_f(R) - \text{Ry}/n_*^2$  (сплошные линии). б) Структура ридберговских состояний  $nl[K]_J$  атома Xe, сходящихся к ионизационному пределу  $5p^5(2P_{3/2})$  и расположенных между двумя водородоподобными сериями  $n$  и  $n-1$ .

Это условие означает, что глубина потенциальной ямы основного электронного терма молекулярного иона с учетом центробежного члена должна при  $0 \leq J < J_{max}$  превышать величину  $|E|$ .

#### 4. КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ РЕЗОНАНСНОГО ЗАХВАТА ЭЛЕКТРОНОВ

##### 4.1. Константа скорости резонансной тройной рекомбинации

Исходное выражение для константы скорости  $K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(T) = \langle V_E \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(E) \rangle_T [\text{см}^5]$  тройной рекомбинации (2) при заданных значениях энергии свободных электронов  $\varepsilon$  и температуры газа  $T$  имеет вид

$$K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(T) = \int_0^\infty dE f_T(E) V_E \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(E), \quad (29)$$

где  $f_T(E)$  — функция распределения кинетической энергии  $E = \mu V^2/2$  относительного движения частиц A<sup>+</sup> и B. Подставим выражение (22) в (29) и используем соотношение (17). Так же, как и в разд. 3.2, введем безразмерные переменные  $\nu$ ,  $\epsilon$  и функцию

$\Lambda_\nu(R_\omega)$ . Тогда в случае максвелловского распределения

$$f_T(E) dE = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{E}{k_B T} \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{E}{k_B T} \right) d \left( \frac{E}{k_B T} \right)$$

для константы скорости рекомбинации (29) при заданных значениях газовой температуры  $T$  и энергии электрона  $\varepsilon$  получим формулу

$$K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(T) = (2l+1) \tilde{g}_{tr} \frac{2\pi^2}{k^2} \frac{4\pi R_\omega^2 \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \times \exp \left( -\frac{U_i(R_\omega)}{k_B T} \right) \Theta_T^{tr}(R_\omega). \quad (30)$$

Здесь  $\Theta_T^{tr}(R_\omega)$  — безразмерная функция:

$$\Theta_T^{tr}(R_\omega) = 2\sqrt{\pi} \int_{\epsilon_{min}^{tr}}^\infty d\epsilon \exp(-\epsilon) \times \int_0^\infty d\nu \sqrt{\Lambda_\nu(R_\omega)} \text{Ai}^2[-\Lambda_\nu(R_\omega)(\epsilon - \nu)], \quad (31)$$

$$\epsilon_{min}^{tr} = \epsilon_{max}^{dr} = -U_i(R_\omega)/k_B T.$$

Константа скорости,  $\beta_{nl}^{tr} = \langle v_\varepsilon \langle V_E \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(E) \rangle \rangle$  [см<sup>6</sup>·с<sup>-1</sup>], резонансного трехчастичного захвата электрона (2) вычисляется путем усреднения величины  $v_\varepsilon K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(T)$  по распределению скоростей свободных электронов при температуре  $T_e$ :

$$\beta_{nl}^{tr}(T_e, T) = \int_0^\infty d\varepsilon f_{T_e}(\varepsilon) v_\varepsilon K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(T). \quad (32)$$

Подставим выражение (30) в (32) и заменим интегрирование по энергии свободных электронов  $\varepsilon$  на интегрирование по энергии перехода,  $\hbar\omega$ , а затем с помощью соотношения  $d(\hbar\omega) = d[\Delta U_{fi}(R_\omega)] = \Delta U_{fi}(R_\omega) dR_\omega$  на интегрирование по межъядерному расстоянию  $dR$ . В результате в случае максвелловского распределения  $f_{T_e}(\varepsilon)$  энергии электронов приходим к следующему выражению для константы скорости резонансного трехчастичного захвата электрона на заданный ридберговский  $nl$ -уровень атома:

$$\begin{aligned} \beta_{nl}^{tr}(T_e, T) &= (2l+1) \tilde{g}_{tr} \left( \frac{2\pi\hbar^2}{m_e k_B T_e} \right)^{3/2} \times \\ &\times \exp \left( \frac{|\varepsilon_{nl}|}{k_B T_e} \right) \int_0^{R_{nl}} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R)}{\hbar} \exp \left( -\frac{\Delta U_{fi}(R)}{k_B T_e} \right) \times \\ &\times \exp \left( -\frac{U_i(R)}{k_B T} \right) \Theta_T^{tr}(R) 4\pi R^2 dR, \end{aligned} \quad (33)$$

где  $R_{nl}$  задается условием  $\Delta U_{fi}(R_{nl}) = |\varepsilon_{nl}|$ , т. е. совпадает с точкой стабилизации (14).

Простые квазиклассические выражения для констант скоростей  $K_{\varepsilon \rightarrow nl}^{tr}(T)$  и  $\beta_{nl}^{tr}(T_e, T)$  можно получить, используя асимптотическое выражение

$$\text{Ai}^2(-x) \xrightarrow[x \rightarrow +\infty]{} \frac{1}{\pi x^{1/2}} \sin^2 \left( \frac{2}{3} x^{3/2} + \frac{1}{4} \pi \right) \quad (34)$$

для квадрата функции Эйри и усредняя полученный результат по периоду осцилляций. При этом интегрирование по квадрату орбитального момента  $J^2$  движения ядер лишь в классически разрешенной области выполняется в пределах  $0 \leq J^2 \leq J_{max}^2$ , где

$$J_{max} = \sqrt{2\mu R_\omega^2(E - U_i(R_\omega))/\hbar^2}. \quad (35)$$

Соответственно, в квазиклассическом приближении при учете движения ядер лишь в классически разрешенной области верхний предел в интеграле по  $d\nu$  в (31) следует изменить с  $\infty$  на  $\epsilon$ :

$$\begin{aligned} \Theta_T^{tr}(R_\omega) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\epsilon_{min}^{tr}}^\infty d\epsilon \exp(-\epsilon) \int_0^\epsilon \frac{d\nu}{(\epsilon - \nu)^{1/2}} = \\ &= \begin{cases} 1, & R_\omega < R_0, \\ \Gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/k_B T)/\Gamma(3/2), & R_\omega \geq R_0. \end{cases} \end{aligned} \quad (36)$$

$$\text{где } \Gamma(3/2, z) = \int_z^\infty t^{1/2} \exp(-t) dt.$$

#### 4.2. Константа скорости диссоциативной рекомбинации в двухтемпературной плазме

Константу скорости диссоциативной рекомбинации,  $\alpha_{nl}^{dr}(T_e, T)$  [см<sup>3</sup>·с<sup>-1</sup>], в плазме с температурами  $T$  и  $T_e$  ее газовой и электронной компонент можно получить усреднением величины  $v_\varepsilon \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(T)$  (см. (27)) по функции распределения свободных электронов по скорости,  $f_{T_e}(\varepsilon)$ :

$$\alpha_{nl}^{dr}(T_e, T) = \int_0^\infty v_\varepsilon \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{dr}(T) f_{T_e}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (37)$$

Подставим выражение (27) в (37) и заменим (так же, как и при выводе финальной формулы (33) для константы скорости резонансной трехчастичной рекомбинации) интегрирование по энергии свободных электронов  $\varepsilon$  на интегрирование по энергии перехода,  $\hbar\omega$ , а затем на интегрирование по межъядерному расстоянию  $dR$ . Тогда после ряда преобразований и перехода к безразмерным переменным (26) получим для интегрального вклада всех колебательно-вращательных уровней молекулярного иона в суммарную константу скорости диссоциативного захвата электронов на заданный ридберговский уровень атома A( $nl$ ) следующее выражение:

$$\begin{aligned} \alpha_{nl}^{dr}(T_e, T) &= (2l+1) \tilde{g}_{dr} \left( \frac{2\pi\hbar^2}{m_e k_B T_e} \right)^{3/2} \frac{e^{-D_0/k_B T}}{Z_{vr}(T)} \times \\ &\times \left( \frac{\mu k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{|\varepsilon_{nl}|}{k_B T_e} \right) \int_{R_0}^{R_{nl}} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R)}{\hbar} \times \\ &\times \exp \left( -\frac{\Delta U_{fi}(R)}{k_B T_e} \right) \exp \left( -\frac{U_i(R)}{k_B T} \right) \times \\ &\times \Theta_T^{dr}(R_\omega) 4\pi R^2 dR, \end{aligned} \quad (38)$$

где  $R_0$  и  $R_{nl}$  находятся из уравнений  $U_i(R_0) = 0$  (см. рис. 1) и  $\Delta U_{fi}(R_{nl}) = |\varepsilon_{nl}|$ . Для процесса (1) безразмерный коэффициент  $\Theta_T^{dr}$  определяется выражением (28).

В квазиклассическом приближении выражение для коэффициента  $\Theta_T^{dr}(R_\omega)$  и, соответственно, для

константы скорости  $\alpha_{nl}^{dr}(T_e, T)$  диссоциативного захвата электронов на заданный ридберговский уровень атома A( $nl$ ) существенно упрощается. В соответствии с (26) нижний и верхний пределы интегрирования в (28) по  $\epsilon$  становятся равными  $\epsilon_{min}^{dr} = -U_f(R)/k_B T$  и  $\epsilon_{max}^{dr} = -U_i(R)/k_B T$ , а интегрирование по  $\nu$  должно проводиться в пределах  $0 \leq \nu \leq \epsilon$ , что отвечает движению ядер лишь в классически разрешенной области. Тогда с учетом (34) имеем

$$\Theta_T^{dr}(R_\omega) = \begin{cases} 0, & R_\omega < R_0, \\ \frac{\gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/k_B T)}{\Gamma(3/2)}, & R_\omega \geq R_0, \end{cases} \quad (39)$$

где  $\gamma(3/2, z) = \int_0^z t^{1/2} \exp(-t) dt$ .

#### 4.3. Суммарный вклад непрерывного и дискретного спектров квазимолекулы

При проведении практических расчетов зачастую интерес представляют абсолютные скорости захвата электронов в ридберговские состояния  $W_{nl}$  [с<sup>-1</sup>]. Эти скорости, естественно, зависят от концентраций частиц в исходных каналах реакций. Для исследуемых нами процессов (1) и (2) скорости реакций  $W_{nl}$  выражаются следующим образом:

$$W_{nl}^{tr} = \beta_{nl}^{tr} N_B N_{A+}, \quad W_{nl}^{dr} = \alpha_{nl}^{dr} N_{BA+}, \\ N_{BA+} = \sum_{vJ} N_{BA+}^{(vJ)}, \quad (40)$$

а числа соответствующих актов рекомбинации в единице объема в единицу времени получаются домножением величин (40) на концентрацию свободных электронов в плазме:  $\mathfrak{W}_{nl}^{tr} = W_{nl}^{tr} N_e$  и  $\mathfrak{W}_{nl}^{dr} = W_{nl}^{dr} N_e$ . Полную скорость резонансного захвата электронов на атомный уровень  $nl$  можно определить как

$$W_{nl}^{res} = \beta_{nl}^{tr} N_B N_{A+} + \alpha_{nl}^{dr} N_{BA+}. \quad (41)$$

Когда молекулярные ионы BA<sup>+</sup> находятся в равновесии с частицами B и A<sup>+</sup> в непрерывном спектре, закон действующих масс для равновесной концентрации  $N_{BA+}$  связанных ионов в начальном состоянии

$$\frac{N_{BA+}}{N_B N_{A+}} = \frac{Z_{vr} g_{BA+}}{g_B g_{A+}} \left( \frac{2\pi\hbar^2}{\mu k_B T} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{D_0}{k_B T}\right) \quad (42)$$

позволяет переписать выражение для  $W_{nl}^{dr}$  в виде

$$W_{nl}^{dr}(T_e, T) = \alpha_{nl}^{dr}(T_e, T) N_B N_{A+} \tilde{g}_{tr} Z_{vr} \times \\ \times \exp\left(\frac{D_0}{k_B T}\right) \left( \frac{2\pi\hbar^2}{\mu k_B T} \right)^{3/2} \equiv \\ \equiv \beta_{nl}^{dr}(T_e, T) N_B N_{A+}. \quad (43)$$

Здесь введена константа скорости  $\beta_{nl}^{dr}(T_e, T)$  [см<sup>6</sup>·с<sup>-1</sup>] диссоциативной рекомбинации, нормированная на произведение концентраций атомарных ионов и нейтральных атомов. Для расчета статистической суммы (24) используем применимую при  $k_B T \gtrsim \hbar\omega_e$  квазиклассическую формулу [25]:

$$Z_{vr}(T) = 4\pi\mathfrak{s}^{-1} \left( \frac{\mu k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{D_0}{k_B T}\right) \times \\ \times \int_{R_0}^{\infty} \left[ 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{3}{2}, \frac{|U_i(R)|}{k_B T}\right) \right] \times \\ \times \exp\left(-\frac{U_i(R)}{k_B T}\right) R^2 dR, \quad (44)$$

где  $R_0$  находится из уравнения  $U_i(R_0) = 0$  (см. рис. 1).

Формулы (40) и (43) позволяют ввести полную константу скорости,  $\beta_{nl}^{res} = W_{nl}^{res}/(N_B N_{A+})$ , резонансного захвата электронов, которая включает в себя вклады тройной и диссоциативной рекомбинации:

$$\beta_{nl}^{res} = \beta_{nl}^{tr} + \beta_{nl}^{dr}. \quad (45)$$

Данное выражение особенно удобно, в частности, для выяснения суммарной роли резонансных процессов (1) и (2) по сравнению с нерезонансными процессами тройной рекомбинации в столкновениях с электронами и нейтральными частицами плазмы.

В квазиклассическом приближении при учете движения ядер лишь в классически разрешенной области для  $\beta_{nl}^{res}$  легко получить упрощенное выражение. Учитывая, что при этом  $\Theta_T^{tr}(R) + \Theta_T^{dr}(R) = 1$ , и используя формулы (33) и (38), получим

$$\beta_{nl}^{res}(T_e, T) = (2l+1) \tilde{g}_{tr} \left( \frac{2\pi\hbar^2}{m_e k_B T_e} \right)^{3/2} \times \\ \times \exp\left(\frac{|\varepsilon_{nl}|}{k_B T_e}\right) \int_0^{R_{nl}} \frac{\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R)}{\hbar} \times \\ \times \exp\left(-\frac{\Delta U_{fi}(R)}{k_B T_e}\right) \exp\left(-\frac{U_i(R)}{k_B T}\right) 4\pi R^2 dR. \quad (46)$$

В данной работе мы в основном имеем дело с константами скоростей реакций, нормированными на произведение концентраций  $N_B$  и  $N_{A+}$ . При тепловом равновесии тяжелых частиц соотношение (42)

позволяет вместо этого использовать концентрации молекулярных ионов  $N_{\text{BA}^+}$ , так что основным фактором, определяющим выбор нормировки, является отношение энергии диссоциации к величине  $k_B T$ . В экспериментах функции распределения молекулярных ионов по колебательно-вращательным уровням и распределения относительных скоростей частиц могут существенно отличаться от равновесных. Поэтому выбор нормировки зачастую определяется конкретными физическими условиями.

В случае электрон-ионной рекомбинации, сопровождающейся образованием ридберговских атомов, интерес представляют суммарные по всем значениям  $lm$  уровня  $n$  сечения и константы скоростей,

$$\sigma_{\varepsilon \rightarrow n} = \sum_{l=0}^{n-1} \sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}, \quad \beta_n^{res} = \sum_{l=0}^{n-1} \beta_{nl}^{res}. \quad (47)$$

В формулах (22), (27) и (33), (38) сечения  $\sigma_{\varepsilon \rightarrow nl}^{res}$  и константы скорости  $\beta_{nl}^{res}$  резонансного захвата электрона на уровне  $nl$  выражаются через ширины  $\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}$  автоионизации ридберговских квазимолекул  $\text{VA}(f, nl)$ . При расчете (47) удобно заменить  $(2l+1)\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}$  в выражениях (22) и (27) на эффективный параметр связи

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}_{\varepsilon \rightarrow n} &= \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}(R_\omega) = \\ &= 2\pi \sum_{ml, m'l'} \left| V_{i, \varepsilon l' m'}^{f, nlm}(R_\omega) \right|^2, \end{aligned} \quad (48)$$

описывающий полный вклад отдельных  $nl$ -уровней в захват электронов во все  $nlm$ -состояния с заданным  $n$ . Отметим, что для неводородоподобных состояний атомов со значительными квантовыми дефектами  $\delta_l$  значения  $R_\omega$  для каждого члена суммы по  $l$  отличаются друг от друга из-за зависимости  $\delta_l$  от орбитального момента. Поэтому суммарные сечения и константы скорости захвата электрона (47) при заданном значении  $n$  должны, вообще говоря, быть определены путем суммирования отдельно рассчитанных вкладов от различных значений  $l$ .

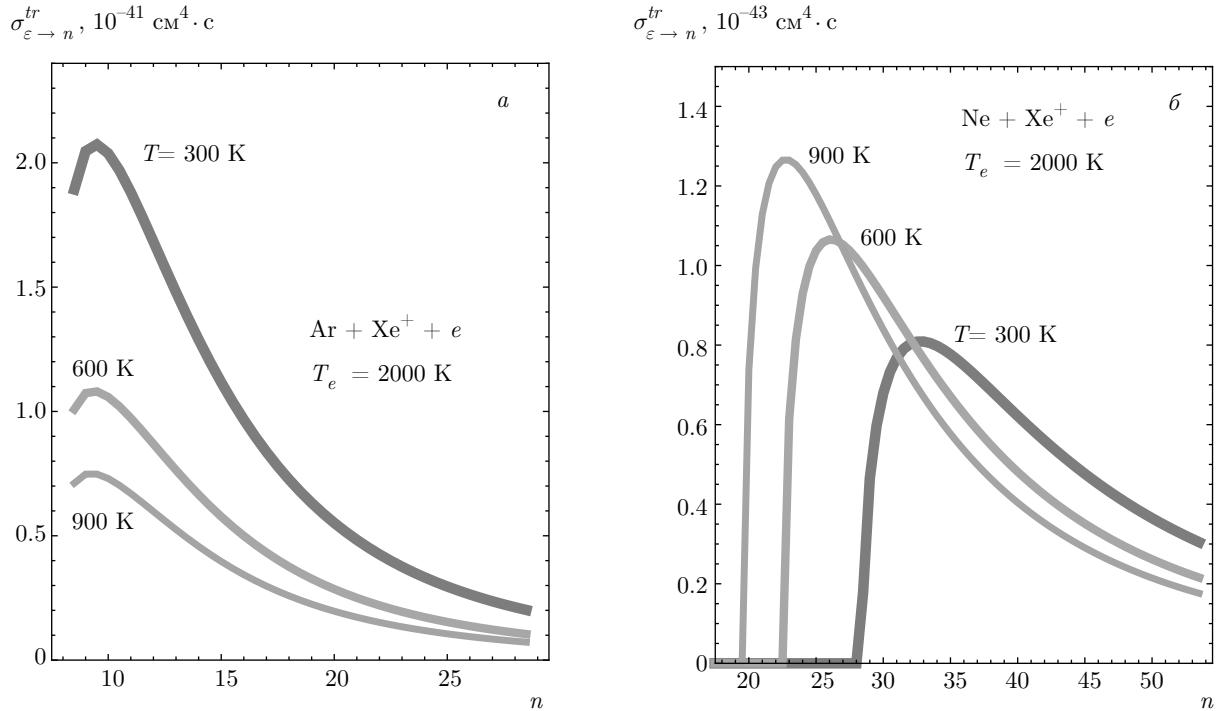
## 5. ШИРИНЫ АВТОИОНИЗАЦИОННОГО РАСПАДА РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ

При расчетах автоионизационных ширин распада,  $\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}$ , и эффективного параметра взаимодействия,  $\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \rightarrow n}$ , внешнего и внутренних электронов в квазимолекулярной системе  $\text{RgXe}^+ + e$  следует

учитывать сложную структуру ридберговских уровней атома ксенона и особенности электронных термов гетероядерных ионов инертных газов  $\text{RgXe}^+$  ( $\text{Rg} = \text{Ne}(2s^2 2p^6 {}^1S_0)$ ,  $\text{Ar}(3s^2 3p^6 {}^1S_0)$ ). Электронная конфигурация иона  $\text{Xe}^+$ ,  $5s^2 5p^5$ , вызывает сильное спин-орбитальное расщепление,  $\Delta_{3/2, 1/2} = 1.3$  эВ, электронных термов, сходящихся к состояниям  ${}^2P_{j=3/2}$  и  ${}^2P_{j'=1/2}$  (см. рис. 1a). В исследуемом диапазоне электронных и газовых температур высоколежащий терм  $A_2 |j' = 1/2, \Omega' = 1/2\rangle$ , коррелирующий с состоянием  ${}^2P_{j'=1/2}$ , и все более высокие термы можно исключить из рассмотрения. Свободно-связанные переходы внешнего электрона системы  $\text{RgXe}^+ + e$  в процессах рекомбинации (1) и (2) обусловлены, таким образом, переходом  $X |j_i = 3/2, \Omega_i = 1/2\rangle \rightarrow A_1 |j_f = 3/2, \Omega_f = 3/2\rangle$  между основным  $U_i(R)$  и первым возбужденным  $U_f(R)$  электронными термами иона  $\text{RgXe}^+$ . Ридберговские состояния  $\text{Xe}[5p^5({}^2P_j)nl[K]_{\mathcal{J}}]$  характеризуются набором квантовых чисел  $n, l, K$  и  $\mathcal{J}$ , где  $K$  — квантовое число углового момента  $\mathbf{K} = \mathbf{j} + \mathbf{l}$ , а  $\mathcal{J} = K \pm 1/2$  и  $j = 3/2, 1/2$  — полные моменты ридберговского атома и атомного отстатка соответственно. Как видно из рис. 1б, подуровни  $nl[K]_{\mathcal{J}}$  при  $l = 0, 1, 2$  имеют большие квантовые дефекты  $\delta_{\mathcal{J}}$ , в то время как подуровни  $nl[K]_{\mathcal{J}}$  с  $l \geq 3$  имеют почти водородоподобную структуру [26]. Структуру ридберговских уровней Хе можно приближенно учесть, введя эффективное главное квантовое число  $n_* = n - \delta_{nl}^{eff}$ . Здесь  $\delta_{nl}^{eff}$  — эффективный квантовый дефект, полученный усреднением по набору квантовых дефектов  $\delta_{nl[K]_{\mathcal{J}}}$ . Это оправдано, так как  $|\delta_{nl}^{eff} - \delta_{nl[K]_{\mathcal{J}}}| \ll \delta_{nl}^{eff}$  для  $l = 0, 1, 2$ .

Расчеты величин  $\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}$  и  $\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \rightarrow n}$  для рассматриваемых систем  $\text{RgXe}^+ + e$  были проведены с использованием модели вакансий [14, 17]. Она сводит взаимодействие внешнего электрона со всеми внутренними электронами молекулярного иона к взаимодействию,  $V = -e^2/|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_v|$ , ридберговского электрона ( $\mathbf{r}_e$ ) с положительно заряженной одноэлектронной вакансией ( $\mathbf{r}_v$ ) в электронной оболочке иона  $\text{Xe}^+(5s^2 5p^5 {}^2P_{3/2})$ , описываемой радиальной волновой функцией  $\mathcal{R}_{5p}(r_v)$ . Взаимодействием ридберговского электрона с электронами замкнутой электронной оболочки атома  $\text{Rg}({}^1S_0)$  можно в первом приближении пренебречь. Поэтому входящие в выражение для эффективного параметра связи,

$$\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \rightarrow n} = \frac{4\pi}{25} \sum_{ll'} \frac{\gamma_{ll'}}{n_*^3}, \quad (49)$$



**Рис. 2.** Сечения  $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{tr}(E)$  [ $\text{см}^4 \cdot \text{с}$ ] резонансного трехчастичного захвата (2) на все  $lm$ -подуровни ридберговского уровня  $n$  (22) для систем  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  (а) и  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$  (б) при энергиях  $\varepsilon = k_B T_e / 2$  ( $T_e = 2000$  К) и  $E = k_B T / 2$  ( $T = 300$ , 600 и 900 К)

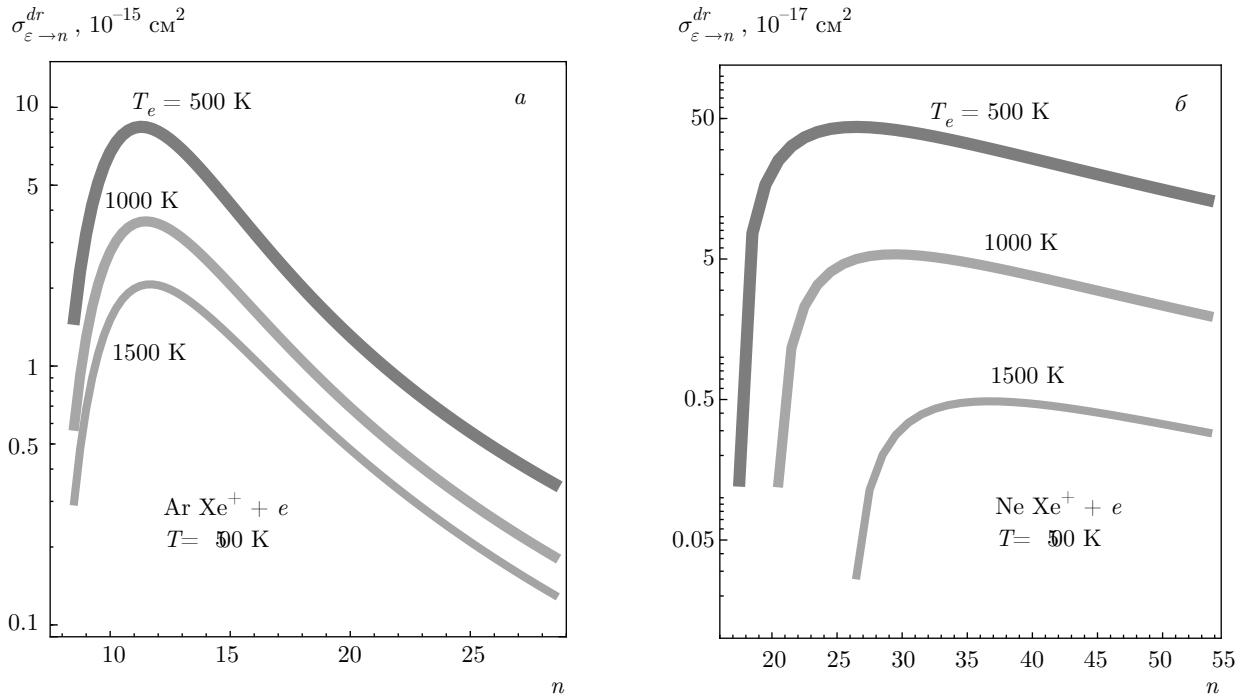
величины  $\gamma_{ll'}$  и, соответственно,  $\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \rightarrow n}$  от  $R$  не зависят. Способ расчета величин  $\gamma_{ll'}$  изложен в работах [14, 17] за исключением того, что волновые функции ридберговских состояний со значительным квантовым дефектом вычислялись методом [27].

## 6. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

### 6.1. Сечения резонансного захвата электрона

Ниже приведены результаты расчета сечений изучаемых рекомбинационных процессов в плазме смесей инертных газов  $\text{Rg}/\text{Xe}$  при электронных и газовых температурах, типичных для газоразрядных экспериментов. Здесь мы ограничиваемся рассмотрением резонансных процессов в гетероядерных системах. Хорошо известно, что в плазмах смесей  $\text{Rg}/\text{Xe}$  могут содержаться ионы  $\text{Xe}_2^+$ , диссоциативная рекомбинация которых является эффективным процессом. Вместе с тем, значительное число экспериментальных работ выполняется при условиях, когда концентрация ксенона в смеси весьма мала,  $[\text{Xe}] \ll [\text{Rg}]$ . В этом случае ионов  $\text{Xe}_2^+$  в плазме может оказаться существенно меньше, чем ионов  $\text{RgXe}^+$  [17, 28, 29].

На рис. 2 приведены зависимости сечений резонансного захвата  $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{tr}$  от главного квантового числа для систем  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  и  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ . Расчеты проведены для энергий электронов и тяжелых частиц, соответствующих максимумам распределения Максвелла ( $\varepsilon = k_B T_e / 2$  и  $E = k_B T / 2$ ) при электронной температуре  $T_e = 2000$  К и газовых температурах  $T = 300$ , 600 и 900 К. В сечениях имеется ярко выраженный максимум, определяющий область значений  $n$  с преимущественным рекомбинационным заселением. Максимумы достигаются при  $n_{max} \approx 10$  для  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  и  $n_{max} \approx 20 \div 35$  для  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ . Значения  $n_{max}$  столь сильно различаются из-за большой разницы в энергиях диссоциации гетероядерных ионов. На рис. 2 видно резкое убывание сечений захвата для системы  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$  с уменьшением  $n$  при  $n < n_{max}$ , что обусловлено смещением точки  $R_\omega$  резонансного перехода в классически запрещенную область. В системе  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  положение максимума почти не зависит от энергии столкновения, в то время как для  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$  наблюдается сдвиг  $n_{max}$  в сторону меньших  $n$  при увеличении  $E = \mu V^2 / 2$ . Это различие вызвано тем, что в системах с более высокими значениями  $D_0$  точка перехода при малых  $n$  обычно лежит вблизи полож-



**Рис. 3.** Усредненные по распределению Больцмана ( $T = 500 \text{ K}$ ) сечения диссоциативного захвата,  $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{dr}(T) [\text{см}^2]$  (27) на все  $lm$ -подуровни ридберговского уровня  $n$  для молекулярных ионов  $\text{ArXe}^+$  (a) и  $\text{NeXe}^+$  (б). Расчеты проведены при значениях энергии электронов,  $\varepsilon = k_B T_e / 2$ , указанных на рисунке

жения равновесия,  $R_e$ , нижнего терма, и допустимыми становятся переходы даже при низких энергиях  $E$ . Когда энергия диссоциации  $D_0$  мала, захваты на низкие  $n$  происходят при  $R_\omega \lesssim R_e$  в отталкивательной части терма, так что низкие энергии  $E$  классически недопустимы.

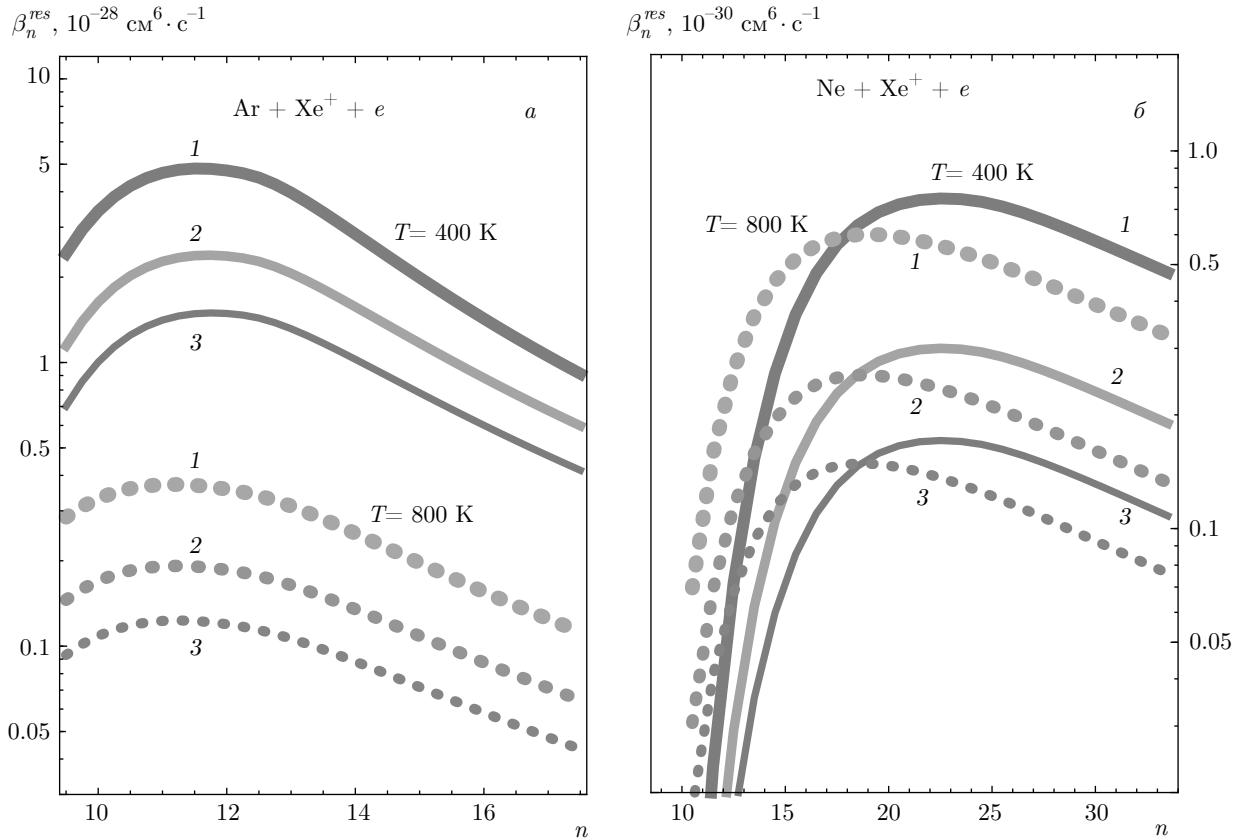
Эффективные сечения диссоциативного захвата электронов ионами  $\text{ArXe}^+$  и  $\text{NeXe}^+$ , усредненные по большинству распределению (27) при  $T = 500 \text{ K}$ , приведены на рис. 3. Энергия электронов взята равной  $\varepsilon = k_B T_e / 2$  при  $T_e = 500 \div 1500 \text{ K}$ . Сечения уменьшаются с ростом  $T_e$ . Подобно резонансному трехчастичному захвату, в зависимостях сечений  $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{dr}(T)$  от  $n$  имеется максимум, смещающийся в сторону низких  $n$  при увеличении  $D_0$ . Его положение определяется условием  $R_\omega \approx R_e$ . В случае  $\text{ArXe}^+$  максимум расположен вблизи  $n_{max} \approx 12$ , и  $n_{max}$  почти не зависит от  $T_e$ . Для  $\text{NeXe}^+$  максимум лежит при  $n > 20$  и быстро смещается в сторону высоких  $n$  с ростом  $T_e$ .

## 6.2. Зависимости константы скорости резонансного захвата электрона от $n$ , $T$ и $T_e$

На рис. 4 показаны зависимости от  $n$  суммарных констант скоростей,  $\beta_n^{res} = \beta_n^{tr} + \beta_n^{dr}$ , резонансного

захвата электронов в ридберговские состояния. Расчеты проведены для систем  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  и  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$  при температурах электронов  $T_e = (1 \div 3) \cdot 10^3 \text{ K}$  и газа  $T = 400 \text{ K}$  и  $800 \text{ K}$ . Такой выбор систем и температур позволяет исследовать поведение  $\beta_n^{res}$  как в случае слабосвязанных ионов,  $D_0 \lesssim k_B T$ , ( $\text{NeXe}^+$ ,  $D_0 = 33 \text{ мэВ}$ ), так и в случае ионов с  $D_0 \gg k_B T$  ( $\text{ArXe}^+$ ,  $D_0 = 176 \text{ мэВ}$ ). Величины констант скоростей для этих систем сильно различаются: значения  $\beta_n^{res}$  в максимуме для  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  оказываются на 2–3 порядка выше, чем значения  $\beta_n^{res}$  в максимуме для  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ . Значительная разница обусловлена тем, что в системах с умеренными энергиями диссоциации (таких как  $\text{Ar} + \text{Xe}^+$ ) возрастает вероятность образования связанных молекулярных ионов, участвующих в диссоциативном захвате. Таким образом, обычно в условиях квазиравновесия эффективность резонансной рекомбинации оказывается выше в системах с большими  $D_0$ .

Качественно различным для систем с промежуточными и малыми энергиями диссоциации ( $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  и  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ ) оказывается и характер зависимостей констант скоростей захвата  $\beta_n^{res}(T_e, T)$ . Для системы  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  наблюдается острый максимум в зависимости от  $n$  при  $n_{max} \approx 11$  (рис. 4). Для подобных систем с умеренными или большими



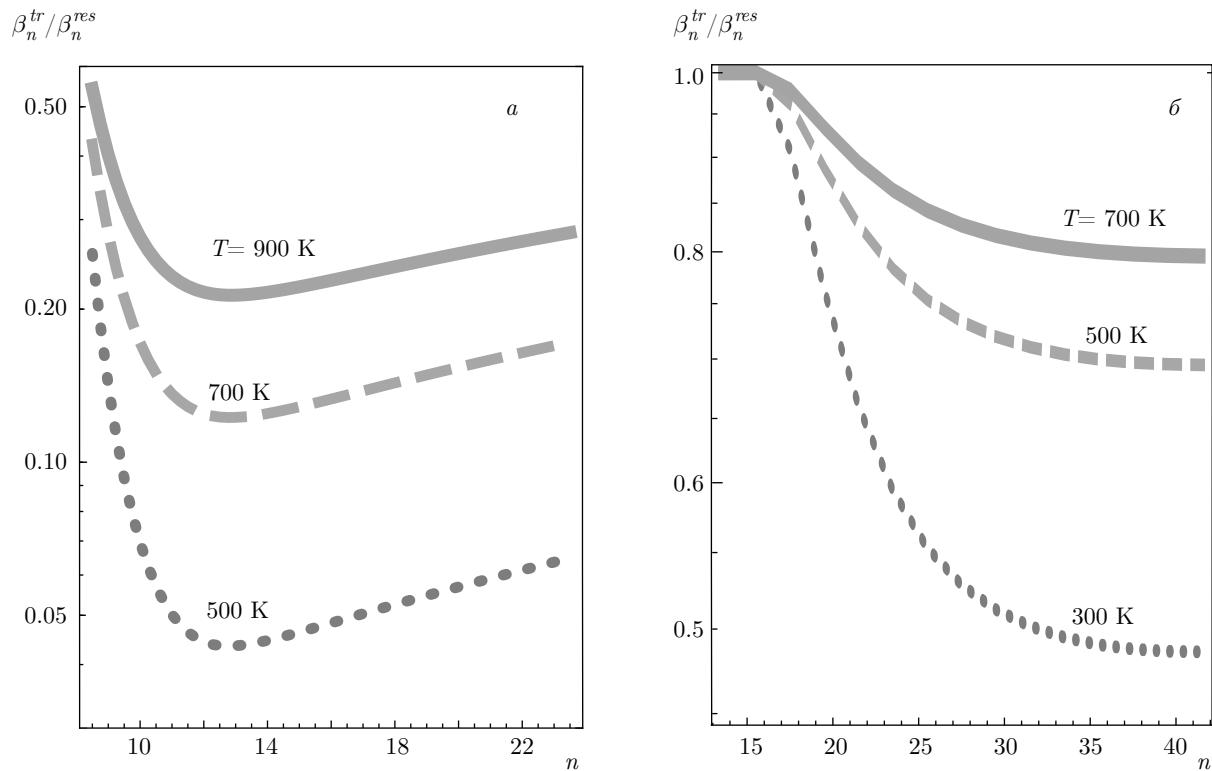
**Рис. 4.** Константы скорости,  $\beta_n^{res} = \beta_n^{tr} + \beta_n^{dr}$ , резонансного захвата электронов на все  $lm$ -подуровни уровня  $n$  для систем  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  (а) и  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$  (б) при газовых температурах  $T = 400 \text{ K}$  (сплошные кривые) и  $800 \text{ K}$  (пунктирные кривые) и температурах электронов  $T_e = 1000$  (1),  $2000$  (2),  $3000$  (3) К

значениями энергии диссоциации положение  $n_{max}$  определяется из условия  $R_{n_{max}} \approx R_e$  и поэтому почти не зависит от газовых и электронных температур. Такое поведение находится в соответствии с результатами, приведенными на рис. 2а, 3а. При этом значение  $\beta_n^{res}(T_e, T)$  уменьшается на порядок величины с ростом  $T$  от 400 до 800 К, что связано с экспоненциальным уменьшением вероятности формирования связанных молекулярных ионов  $\text{ArXe}^+$ , играющих ключевую роль в реализации канала (1) резонансной диссоциативной рекомбинации.

Иной характер зависимости констант скоростей  $\beta_n^{res}(T_e, T)$  от  $n$  и  $T$  наблюдается для систем с малыми энергиями диссоциации  $D_0$  ( $\text{HeXe}^+$  и  $\text{NeXe}^+$ ). Как видно на рис. 4б, в этом случае заселение нижних уровней с малым  $n$  пренебрежимо мало; преобладает захват на высоковозбужденные уровни ( $n_{max} \approx 20$  для  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ ). При этом с ростом  $T$  максимальное значение константы скорости изменяется мало, а «рабочая» область захвата смещается в сторону меньших  $n$  ( $n_{max} \approx 15$  при  $T = 800 \text{ K}$ ). Это

находится в согласии с результатами, приведенными на рис. 2б и 3б, и связано с тем, что в системах с малыми энергиями диссоциации доминирует резонансный механизм трехчастичного захвата ( $\beta_n^{tr} \gg \beta_n^{dr}$ ), а неадиабатические переходы происходят в основном в отталкивателей части электронного терма (см. рис. 1). Увеличение температуры  $T$  повышает вероятность переходов при малых  $R$ , ведущих к заселению низких уровней.

Рисунки 4а и 4б демонстрируют одинаковый характер зависимости  $\beta_n^{res}(T_e, T)$  от электронной температуры. В каждой из рассматриваемых систем вероятность электронного захвата уменьшается с ростом  $T_e$ : увеличение  $T_e$  в 3 раза приводит к четырехкратному уменьшению константы скорости  $\beta_n^{res}(T_e, T)$ . Данное поведение определяется ростом средней энергии свободных электронов при увеличении  $T_e$ , что смешает точку перехода  $R_\omega$  в области с малой вероятностью нахождения молекулярных ионов.



**Рис. 5.** Относительный вклад,  $\beta_n^{tr}/\beta_n^{res}$ , трехчастичного захвата электрона (2) в полную константу скорости,  $\beta_n^{res} = \beta_n^{tr} + \beta_n^{dr}$ , резонансного захвата на все подуровни уровня  $n$ , включающую также вклад диссоциативного захвата (1) со всех колебательно-вращательных уровней молекулярного иона. Расчеты проведены для  $\text{Ar}+\text{Xe}^+ + e$  (а) и  $\text{Ne}+\text{Xe}^+ + e$  (б) при  $T_e = 2000$  К и различных газовых температурах  $T$

### 6.3. Сравнительный анализ эффективностей резонансных процессов захвата электронов

На рис. 5 приведено сравнение интегральных вкладов диссоциативной (1) и трехчастичной (2) рекомбинации в двухтемпературной плазме смесей инертных газов Rg/Xe ( $[\text{Xe}] \ll [\text{Rg}]$ , Rg = Ar, Ne) в полную константу скорости,  $\beta_n^{res}$ , захвата электрона молекулярными,  $\text{RgXe}^+$ , и атомарными,  $\text{Xe}^+$ , ионами с образованием атомов  $\text{Xe}(n)$ . Видно, что относительный вклад трехчастичного захвата возрастает при уменьшении энергии диссоциации иона за счет увеличения вероятности нахождения системы  $\text{RgXe}^+(i)$  в непрерывном спектре. По той же причине относительная эффективность механизма трехчастичного захвата тем выше, чем выше газовая температура  $T$ . Для системы  $\text{ArXe}^+ + e$  вклад механизма (2) не превышает 50 % даже при достаточно высокой температуре  $T = 900$  К. Напротив, для системы  $\text{NeXe}^+ + e$  с малым значением энергии диссоциации резонансный процесс трехчастичного захвата электрона атомарным ионом  $\text{Xe}^+$  является доминирующим уже при комнатной температуре  $T = 300$  К.

Отметим, что при составлении кинетических моделей рекомбинации в плазмах смесей инертных газов, как правило, обсуждается канал диссоциативной рекомбинации ионов  $\text{RgXe}^+$ , в то время как альтернативный канал (2) предполагается неэффективным (см., например, [28, 30–32]). Как показано выше, вклад тройной рекомбинации в полную константу скорости резонансного захвата может быть сопоставимым или даже многократно превосходить вклад от канала (1). Соответственно, пренебрежение процессом (2) может приводить к существенным ошибкам при проведении кинетических расчетов.

Представленные выше результаты сравнительного анализа резонансных механизмов рекомбинации получены для равновесных распределений скоростей. Отклонение от распределения Максвелла может существенно менять отношения интегральных вкладов дискретного и непрерывного спектров молекулярного иона в полную скорость рекомбинации. Так, эффективным способом измерения коэффициента диссоциативной рекомбинации является метод совмещенных пучков [6], в котором за счет разности потенциалов между анодом и катодом на-

страивается энергия отстройки  $\varepsilon_d$  между электронами и ионами. В таких установках функция распределения скоростей электронов имеет вид [6]

$$f(v_e, v_d) = \frac{m_e}{2\pi k_B T_{\perp}} \exp\left(-\frac{m_e v_{\perp}^2}{2k_B T_{\perp}}\right) \sqrt{\frac{m_e}{2\pi k_B T_{||}}} \times \\ \times \exp\left[-\frac{m_e(v_{||} - v_d)^2}{k_B T_{||}}\right]. \quad (50)$$

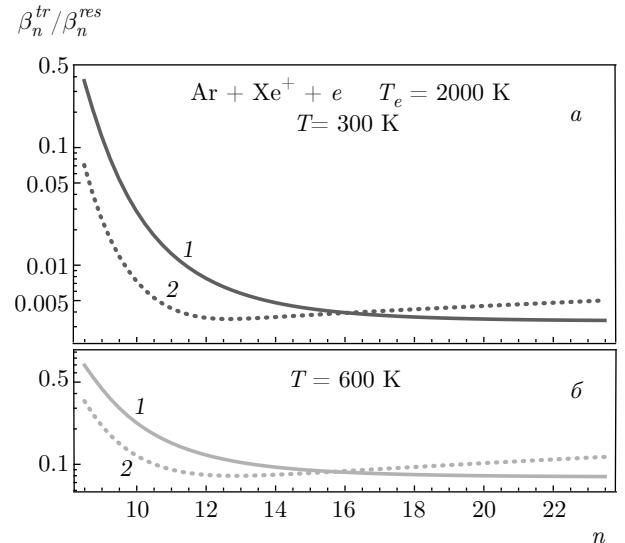
Здесь  $v_d$  — скорость отстройки ( $\varepsilon_d = m_e v_d^2/2$ ),  $v_{\perp}$  — скорость поперечного движения,  $T_{\perp}$  — эффективная температура поперечного движения, обычно равная электронной температуре  $T_e$ . Температура  $T_{||} \ll T_e$  описывает движение электрона вдоль оси установки со скоростью  $v_{||}$  относительно иона;  $T_{||} \sim 1$  мэВ.

Ключевое влияние отстройки на динамику резонансного захвата электрона связано со смещением области резонансных переходов в сторону меньших  $R$ . При больших  $\varepsilon_d$  переходы происходят в основном вблизи точки  $R_{\omega}^d(nl)$ , определяемой из условия  $\Delta U_{fi}(R_n^d) = R_y/n^2 + \varepsilon_d$ . Величина  $\varepsilon_d$  обычно меняется в пределах от 0 до 0.3 эВ, так что при  $\varepsilon_d \sim D_0$  характерная область переходов, происходивших ранее вблизи точки равновесия  $R_e$ , может значительно сместиться в сторону  $R \lesssim R_e$ . Это приводит к росту относительной эффективности механизма трехчастичного захвата электрона на низкие уровни  $n$ .

Данный эффект продемонстрирован на рис. 6 для системы  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  при  $T_e = 2000$  К и  $T = 300$  К и 600 К. Введение энергии отстройки  $\varepsilon_d = 0.15$  эВ увеличивает относительную эффективность процесса трехчастичного захвата на низкие  $n$  до 2 раз при  $T = 600$  К и до 5 раз при  $T = 300$  К. При этом эффективность трехчастичного захвата на уровнях с  $n > 16$ , наоборот, уменьшается, выходя на плато, так как переходы, ранее происходившие вблизи  $R_{\omega}^d(n) > R_e$ , теперь происходят вблизи точки  $R_{\omega}^d(n) \approx R_e$ , определяемой для больших  $n$  условием  $\Delta U_{fi}[R_{\omega}^d(n)] \approx \varepsilon_d$ . Отметим, что влияние неравновесного распределения ослабевает с ростом  $T$  из-за того, что характерная область неадиабатических переходов «размазывается» по  $R$ .

#### 6.4. Сравнение результатов с полуэмпирическими моделями

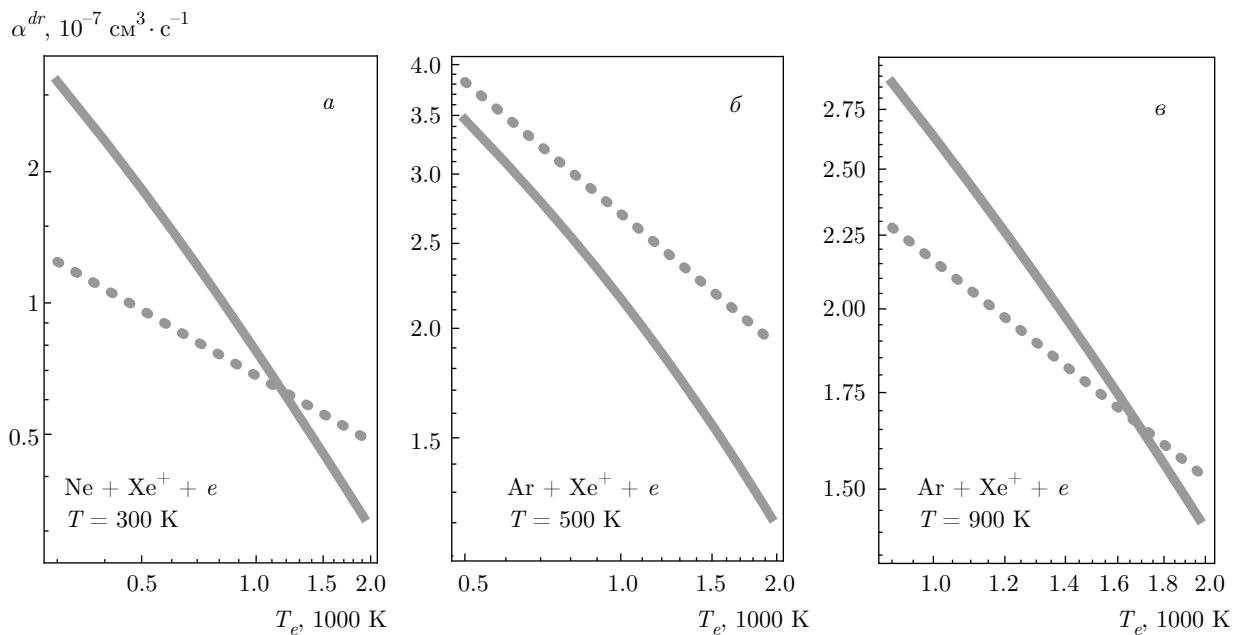
Экспериментальные данные по константам скоростей процессов (1) и (2) диссоциативного и трехчастичного захвата электронов на заданные ридберговские уровни атомов  $\text{Xe}(n)$  в плазме смесей инертных газов отсутствуют. Ниже мы сравниваем просуммированные по  $n$  константы скорости диссоци-



**Рис. 6.** Относительный вклад,  $\beta_n^{tr}/\beta_n^{res}$ , механизма трехчастичного захвата электронов (2) в полную константу скорости,  $\beta_n^{res} = \beta_n^{tr} + \beta_n^{dr}$ , резонансного захвата на все  $lm$ -подуровни уровня  $n$ , также включающую вклад диссоциативной рекомбинации (1),  $\beta_n^{dr}$ . Расчеты проведены для установки с совмещенными пучками с  $\varepsilon_d = 0.15$  эВ (кривые 1) и для равновесного случая (кривые 2) для системы  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  при  $T_e = 2000$  К и  $T = 300$  К (а), 600 К (б)

ативной рекомбинации, рассчитанные с использованием разработанной здесь теории, со значениями  $\alpha^{dr}(T_e, T)$ , полученными с помощью полуэмпирических формул, предложенных в [33, 34] в результате анализа экспериментальных данных для интегральных констант скоростей. На рис. 7а приведены температурные зависимости полных констант скоростей рекомбинации,  $\alpha^{dr}(T_e, T)$ , при столкновениях электронов с ионами  $\text{NeXe}^+$  ( $T = 300$  К) и  $\text{ArXe}^+$  ( $T = 500$  и 900 К). Сплошные кривые показывают суммарную по  $n \geq 10$  и  $l \leq n-1$  константу скорости  $\alpha^{dr}(T_e, T) = \sum_{nl} \alpha_{nl}^{dr}(T_e, T)$  процесса (1), рассчитанную по формулам (27) и (37) данной работы для захвата электрона на отдельные  $nl$ -уровни. Пунктирная кривая для  $\text{NeXe}^+$  получена с помощью полуэмпирической формулы  $\alpha^{dr}(T_e) \sim \alpha_0 T_e^{-0.5}$  [33, 34] и экспериментальных данных [35, 36]. Видно, что результаты разумно согласуются друг с другом при  $T_e = 300 \div 2000$  К. Отметим, что зависимость  $T_e^{-0.5}$  также следует из результатов нашей работы, если ограничить переходы областью точки стабилизации  $R_{\omega} = R_{st} \equiv R_n$ , определяемой условием (14).

Пунктирные кривые на рис. 7б, в для  $\text{ArXe}^+$  задаются формулой модифицированной модели,  $\alpha^{dr}(T, T_e) = \alpha_0 T_e^{-0.5} [1 - \exp(-\hbar\omega_e/k_B T)]$ , предложенной в работах [33, 34] на основе эксперименталь-



**Рис. 7.** Константы скорости диссоциативной рекомбинации ионов  $\text{NeXe}^+$  (а) и  $\text{ArXe}^+$  (б, в) с электронами. Сплошные кривые — суммарная константа скорости,  $\alpha^{dr}(T_e, T) = \sum_{nl} \alpha_{nl}^{dr}(T_e, T)$ , где  $\alpha_{nl}^{dr}(T_e, T)$  получена по формулам (27) и (37). Пунктирные кривые — по полуэмпирической формуле,  $\alpha^{dr}(T, T_e) = \alpha_0 T_e^{-0.5} [1 - \exp(-\hbar\omega_e/k_B T)]$  [33, 34], где  $\alpha_0$  определено по экспериментальным данным [35, 36].  $T = 300 \text{ K}$  (а),  $500 \text{ K}$  (б),  $900 \text{ K}$  (в)

ных данных [36]. Здесь  $\hbar\omega_e$  — колебательный квант основного терма  $U_i$ . Зависимость от  $T$  получена усреднением по бульмановскому распределению колебательных уровней в предположении, что вклад основного колебательного состояния в  $\alpha^{dr}(T, T_e)$  является преобладающим. Как видно на рис 7б, в, такая модель дает разумную оценку при низких значениях  $T$ , однако, подобно  $\text{NeXe}^+$ , она приводит к ошибкам при более высоких значениях  $T_e$  и  $T$ . Заметим, что отклонение от зависимости  $T_e^{-0.5 \pm 0.2}$  константы скорости  $\alpha^{dr}(T, T_e)$  в сторону степенной зависимости  $T_e^{-3/2}$  при больших значениях  $T_e$  было также предсказано в работе [37] для системы  $\text{Ar}_2^+ + e$ . Следует учесть, что оценка коэффициента диссоциативной рекомбинации путем прямого суммирования констант скоростей, соответствующих всем конечным значениям  $n$ , подходит лишь для качественного сравнения результатов, что связано с пренебрежением влиянием ряда сопутствующих рекомбинационных и релаксационных процессов.

## 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследованы взаимно дополняющие процессы (1) и (2) образования атомов в ридберговских состояниях в двухтемпературной плазме, содер-

жающей атомарные и молекулярные ионы. Анализ диссоциативной рекомбинации (1) проведен в условиях существенного теплового возбуждения всех колебательно-вращательных уровней молекулярного иона, что для слабосвязанных ионов  $\text{RgXe}^+$  реализуется уже при температурах  $T \approx 300 \div 1000 \text{ K}$ . Показано, что при этом необходимо учитывать влияние процесса (2) резонансной электрон-ионной рекомбинации в тройных столкновениях с атомами буферного газа.

Для единого описания процессов (1) и (2) разработан оригинальный подход, основанный на квантовом варианте теории неадиабатических переходов и учитывающий вид и симметрию термов иона  $\text{BA}^+$ , особенности взаимодействия внешнего и внутренних электронов в системе и сложную структуру неводородоподобных ридберговских состояний. При расчете суммарных сечений и констант скоростей диссоциативной рекомбинации применено приближение квазинепрерывного спектра для  $vJ$ -уровней иона  $\text{BA}^+$ . Схожий способ интегрирования по энергии  $E$  и угловому моменту  $J$  использован при вычислении констант скоростей реакции (2). В работе впервые получены полуаналитические выражения для сечений и констант скорости процессов (1) и (2), применимые в случае слабосвязанных квазимолеку-

лярных систем и корректно описывающие движение ядер в классически разрешенной и запрещенной областях.

Результирующие выражения разд. 4.3 описывают интегральные вклады состояний дискретного,  $W_{nl}^{dr}$ , и непрерывного,  $W_{nl}^{tr}$ , спектров молекулярного иона в полную скорость,  $W_{nl}^{res}$ , резонансного захвата электронов в ридберговские состояния  $nl$  в плазме с температурами  $T_e$  и  $T$  электронной и атомной (ионной) компонент. Теория может быть использована для гомоядерных и гетероядерных систем,  $A_2^+ + e$  и  $BA^+ + e$ , и вместе с выражениями для эффективного параметра взаимодействия она позволяет установить зависимости величин  $W_{nl}^{dr}$  и  $W_{nl}^{tr}$  от основных параметров задачи: температур  $T_e$  и  $T$ ; главного квантового числа  $n$ ; начального,  $U_i(R)$ , и конечного,  $U_f(R)$ , электронных термов иона  $BA^+$ ; соотношения тепловой энергии  $k_B T$  и энергии диссоциации,  $D_0$ , иона  $BA^+$ .

Конкретные расчеты проведены для гетероядерных систем  $Rg + Xe^+ + e$  с малой ( $NeXe^+$ ) и умеренной ( $ArXe^+$ ) энергиями диссоциации,  $D_0$ , основного терма, представляющих интерес для кинетики рекомбинации в плазме смесей инертных газов  $Rg/Xe$  с малым содержанием ксенона ( $[Xe] \ll [Rg]$ ). Анализ тройной (2) и диссоциативной (1) рекомбинации впервые показал, что доля резонансного трехчастичного захвата электронов атомарными ионами в полной константе скорости может быть близка к 100 % в случае слабосвязанных систем. При этом канал (2) заселяет ридберговские состояния с достаточно высокими значениями  $n \gtrsim 10$ . Зависимости соответствующих констант скоростей от  $n$  оказываются чувствительными к температуре газа  $T$  и структуре термов.

Для молекулярных ионов с относительно глубокими потенциальными ямами,  $D_0 \gg k_B T$ , напротив, преобладает канал диссоциативной рекомбинации с участием большого числа колебательно-вращательных уровней, если выполнено условие  $k_B T \gg \gg \hbar\omega_e$ . Этот вывод относится к ситуациям, когда справедливы Больцмановское распределение по уровням  $vJ$  и закон действующих масс (42) для частиц, находящихся в свободном и связанном состояниях. В работе продемонстрировано, что отклонения от Больцмановского и максвелловского распределений могут приводить к иной относительной роли каналов диссоциативной и тройной рекомбинации и, в частности, могут увеличить долю процесса (2) в захвате электронов на ридберговские уровни.

Полученные результаты представляют интерес для моделирования кинетики рекомбинационных

процессов в барьерных разрядах [5], эксимерных лампах и источниках ВУФ-излучения [38, 39], активных средах мощных газовых лазеров [40, 41] и микроплазменных ячейках [42].

**Финансирование.** Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 19-79-30086).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Физматлит, Москва (2002).
2. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, *Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы*, Наука, Москва (1982).
3. А. В. Елецкий, Б. М. Смирнов, УФН **136**, 25 (1982).
4. M. R. Flannery, *Springer Handbooks of Atom. Mol. Opt. Phys.*, ed. by G. W. F. Drake, Springer, New York (2006), Part D, Ch. 54, p. 799.
5. В. А. Иванов, А. С. Петровская, Ю. Э. Скобло, ЖЭТФ **155**, 901 (2019).
6. M. Larsson and A. E. Orel, *Dissociative Recombination of Molecular Ions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2008).
7. V. S. Lebedev and V. S. Marchenko, J. Sov. Laser Res. **7**, 489 (1986).
8. В. С. Лебедев, В. С. Марченко, ЖЭТФ **84**, 1623 (1983).
9. В. С. Лебедев, В. С. Марченко, Хим. физика **3**, 210 (1984).
10. A. A. Mihajlov, M. S. Dimitrijević, and Z. Djurić, Phys. Scripta **53**, 159 (1996).
11. A. A. Mihajlov, Lj. M. Ignjatović, M. M. Vasilićević et al., Astron. Astrophys. **324**, 1206 (1997).
12. A. A. Mihajlov, Lj. M. Ignjatović, M. S. Dimitrijević et al., Astrophys. J. Suppl. Ser. **147**, 369 (2003).
13. R. K. Janev and A. A. Mihajlov, Phys. Rev. A **21**, 819 (1980).
14. V. S. Lebedev, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **24**, 1993 (1991).
15. V. S. Lebedev, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **24**, 1977 (1991).

16. A. A. Mihajlov, Lj. M. Ignjatović, and M. S. Dimitrijević, *Astron. Astrophys.* **437**, 1023 (2005).
17. Б. А. Иванов, В. С. Лебедев, В. С. Марченко, *ЖЭТФ* **94**, 86 (1988).
18. *Ридберговские состояния атомов и молекул*, под ред. Р. Стеббингса, Ф. Даннинга, Мир, Москва (1985).
19. V. S. Lebedev and I. I. Fabrikant, *Phys. Rev. A* **54**, 2888 (1996).
20. V. S. Lebedev and I. I. Fabrikant, *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **30**, 2649 (1997).
21. В. С. Лебедев, К. С. Кислов, А. А. Нарич, Письма в *ЖЭТФ* **108**, 618 (2018).
22. L. A. Viehland, B. R. Gray, and T. G. Wright, *Mol. Phys.* **107**, 2127 (2009).
23. L. A. Viehland, B. R. Gray, and T. G. Wright, *Mol. Phys.* **108**, 547 (2010).
24. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматлит, Москва (2005).
25. V. S. Lebedev, *Collision Processes of Highly Excited Atoms with Neutral Particles*, Cambridge Sci. Publ., Cambridge (2004).
26. V. L. Sukhorukov, I. D. Petrov, M. Schäfer et al., *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **45**, 092001 (2012).
27. M. J. Seaton, *Comput. Phys. Commun.* **146**, 225 (2002).
28. A. Belasri and Z. Harrache, *Plasma Chem. Plasma Process.* **31**, 787 (2011).
29. O. B. Postel and M. A. Cappelli, *Appl. Phys. Lett.* **76**, 544 (2000).
30. С. В. Автаева, Э. Б. Кулумбаев, *Физика плазмы* **35**, 366 (2009).
31. A. R. Hoskinson, J. Gregorio, J. Hopwood et al., *J. Appl. Phys.* **119**, 233301 (2016).
32. P. Tian and M. J. Kushner, *Plasma Sources Sci. Technol.* **24**, 034017 (2015).
33. J. N. Bardsley and M. A. Biondi, *Adv. Atom. Mol. Phys.* **6**, 1 (1970).
34. J. N. Bardsley, *Phys. Rev. A* **2**, 1359 (1970).
35. L. Levin, S. Moody, E. Klosterman et al., *IEEE J. Quant. Electron.* **17**, 2282 (1981).
36. M. Ohwa, T. J. Moratz, and M. J. Kushner, *J. Appl. Phys.* **66**, 5131 (1989).
37. J. Royal and A. E. Orel, *Phys. Rev. A* **73** 0427061 (2006).
38. S.-J. Park, C. M. Herring, A. E. Mironov et al., *APL Photonics* **2**, 041302 (2017).
39. B. Schütte, F. Campi, M. Arbeiter et al., *Phys. Rev. Lett.* **112**, 253401 (2014).
40. J. P. Apruzese, J. L. Giuliani, M. F. Wolford et al., *J. Appl. Phys.* **104**, 013101 (2008).
41. A. P. Mineev, A. P. Drozdov, S. M. Nefedov et al., *Quant. Electron.* **42**, 575 (2012).
42. C. Qu, P. Tian, A. Semnani, and M. J. Kushner, *Plasma Sources Sci. Technol.* **26**, 105006 (2017).